

光学格子中の Bose-Einstein 凝縮現象に対する場の量子論

早稲田大学理工学部物質開発工学科 山中由也研究室 小林恵太¹

目次

1 序論	813
2 場の量子論と中性原子気体の Bose-Einstein 凝縮	816
2.1 作用、ハミルトニアン	816
2.2 自発的対称性の破れと Bose-Einstein 凝縮	818
2.2.1 大域的位相変換対称性の自発的破れ	819
2.2.2 Off-Diagonal Long-Range Order と自発的対称性の破れ	820
2.2.3 ハミルトニアン、対称性を微小に破る項	821
2.3 Gross-Pitaevskii 方程式	823
3 光学格子中の Bose-Einstein 凝縮	824
3.1 光学格子の概要	824
3.2 光学格子中における凝縮体の振る舞い	825
3.3 非摂動ハミルトニアンの対角化～準粒子描像の構築～	826
3.4 一般化された Bogoliubov 変換	827
3.5 Bogoliubov-de Gennes の方法	832
3.5.1 Bogoliubov-de Gennes 方程式	833
3.5.2 解の直交性、ゼロモード、完全性	834
3.5.3 ハミルトニアンの対角化	838
3.5.4 複素固有値	839
4 光学格子中の強結合近似	840
4.1 Bose-Hubbard モデルと Bose-Einstein 凝縮の取り扱い	840
4.2 光学格子中の Bose-Einstein 凝縮における強結合近似	841
4.2.1 Wannier 関数	841
4.2.2 Gross-Pitaevskii 方程式への強結合近似	843
4.2.3 ハミルトニアンの対角化	844
4.2.4 伝播関数	848

¹E-mail: keita-x@fuji.waseda.jp

4.3	Ward-高橋恒等式	849
4.3.1	Ward-高橋恒等式の導出	849
4.3.2	Ward-高橋恒等式の成立	850
4.4	凝縮体に流れがある場合の強結合近似	852
4.4.1	Wannier 関数	852
4.4.2	Gross-Pitaevskii 方程式への強結合近似	854
4.4.3	ハミルトニアン	855
4.5	ハミルトニアンの解析	856
4.5.1	時間発展方程式	856
4.5.2	固有値方程式の解析	857
4.5.3	$\hbar\omega_{kq}^{(+)}$ の具体的な形	859
4.5.4	ハミルトニアンの対角化 (実固有値)	863
4.5.5	複素固有値	864
4.5.6	演算子の変換	866
4.5.7	ハミルトニアンの「対角化」(複素固有値)	867
4.5.8	Bogoliubov-de Gennes 方程式の固有関数の直交関係との対応	869
5	まとめと展望	870
付録 A	量子補正 (Hartree-Fock-Bogoliubov-Popov 近似)	872
付録 A.1	Hartree-Fock-Bogoliubov-Popov 近似	872
付録 A.2	ハミルトニアンの対角化	874

1 序論

1924 年に Bose は光が粒子性を持ち、互いに区別できない同種粒子であるという仮定から Planck の輻射公式を導いた [1]。Bose の論文に刺激された Einstein は 1925 年に Bose-Einstein 凝縮 (BEC) という現象を予言した [2]。Einstein が予言した BEC とは質量を持つ Bose 粒子からなる理想気体の系がある温度 (相転移温度) 以下になると、巨視的な数の粒子が最低エネルギー状態を占めるというものである。液体ヘリウムの超流動、半導体中のエキシトン等の凝縮現象は本質的に BEC が関与する現象である。しかし理想気体の BEC では $T \simeq 0$ で 100% の粒子が凝縮するのに対して、液体ヘリウムでは 10% 程度である。またこれらの現象は原子間の相互作用が強く理論計算と実験結果を比較することは困難である。

Einstein の予言から 70 年を経て 1995 年に中性原子気体の系で BEC が実現された [3, 4]。中性原子気体の BEC は次のようなプロセスを経て生成される。Doppler 効果を利用したレーザー冷却により原子気体を冷却し、冷却された原子気体を磁気トラップにより空間的に閉じ込める。トラップされた原子気体を蒸発冷却し μK のオーダーまで温度を下げる事により BEC が実現される温度

に至る。冷却された原子集団に対して time of flight 法により運動量分布を観測する。観測された原子集団の運動量分布を観ると運動量がゼロのまわりに鋭いピークが立ち、その事を以って BEC が生成されたことの確認となる [5]。この中性原子気体の BEC が超流動ヘリウム等と異なる点は、原子気体が希薄であり、原子間に働く相互作用が弱いという特徴を兼ね備えていることである。これらの特徴により摂動による理論計算と実験結果との比較が可能になる。また中性原子気体の系は様々なパラメーターの可変性を持つ。原子気体を捕捉するトラップの形状は様々な形状を取ることができ、二重井戸型ポテンシャルや、1次元、2次元系のポテンシャルに閉じ込められた BEC が実現されている。また左右からレーザーを照射し定在波を作ることにより、光学格子という周期的なポテンシャルを作ることができる。さらに Feshbach 共鳴を利用することにより原子間に働く相互作用でさえ斥力から引力まで変化させることが可能になるのである [6]。以上の理由から中性原子気体の系は量子多体系の理論の検証の場として大きな意味を持つ。また量子渦 [7]、ソリトン [8]、スピン自由度をもった BEC [9]、Fermi 原子の超流動 [10] などの実験は興味深く、中性原子気体の系は我々に様々な現象を提供してくれる。

量子多体系を記述する理論として、素粒子理論の発展とともに発展した場の量子論がある。場の量子論は本質的に多体系の量子論であり、素粒子物理学、原子核物理学、宇宙論、量子光学、物性物理と幅広い領域に用いられる基礎理論である。場の量子論の立場から凝縮系の物理を記述するとき、自発的対称性の破れという機構が本質的な役割を果たす。自発的対称性の破れとは系を記述するハミルトニアンが持つ連続変換対称性が自発的に破れ、真空が連続変換に対して不変でなくなるというものである。このとき場の真空期待値がゼロでない有限の期待値を持ち、それが系の秩序変数としての役割を果たす。自発的に対称性が破れた系では系のラグランジアンが元々持つ連続変換不変性を保つためにエネルギーがゼロとなるモードの存在が要求される (南部-Goldstone の定理) [11]。この南部-Goldstone の定理は、素粒子物理から物性物理まで多くの分野で重要な役割を持つ。中性原子気体の BEC は場の量子論の立場から次のように特徴付けられる。まず自発的対称性の破れの機構から BEC は位相変換対称性が自発的に破れた系と理解される。トラップされた中性原子気体の BEC は位相変換対称性が自発的に破れ、またトラップにより空間並対称性が明らかに破れ、有限領域に閉じ込められた系であると特徴付けられる。本研究では量子多体系の基礎理論である場の理論を用いて中性原子気体の BEC の検証を行う。

本研究で対象にする具体的な系として、光学格子に閉じ込められた中性原子気体の BEC を扱う。光学格子に閉じ込められた中性原子気体の BEC では超流動-絶縁体転移 [12]、Bloch 振動 [13] 等の新しい現象が報告されている。この系が重要である一つの理由は、固体物理等で培われてきた理論的手法の応用が可能であることである。また、逆に光学格子に閉じ込められた Fermi 粒子の系は、格子欠陥のない理想的な結晶中における電子の計に相当し、前者を調べることが後者の理論の検証という意味でも大きな意味を持つ。本研究では光学格子中の中性原子気体の BEC を対象とし、基礎理論である場の量子論に基づいた解析を行う。

本論文の構成は以下の通りである。

第2章においてトラップされた中性原子気体の作用を与え、ハミルトニアンを導出する。次に

自発的対称性の破れの機構を導入し、量子場の真空期待値として凝縮体を表す秩序変数を導入する。次にループ展開におけるツリーレベルで秩序変数が従う Gross-Pitaevskii (GP) 方程式 [14] を導出する。

第3章では光学格子中に閉じ込められた中性原子気体の BEC における準粒子のエネルギースペクトルを求めるためにハミルトニアンに対角化を行う。多くの理論では最低エネルギーモードの生成消滅演算子を c -数に置き換える Bogoliubov 近似が用いられるが、それでは場の量子論の基本要請である正準交換関係が明白に破れてしまう。また Bogoliubov 近似はゼロモードを考慮に入れない形式になっているが、ゼロモードは自発的対称性の破れにおいて不可欠であり、理論の自己無撞着性を満足するためには必要である。並進対称性がない場合にハミルトニアンに対角化する方法として、一般化された Bogoliubov 変換 [15] と Bogoliubov-de Gennes (BdG) [16] の方法が知られている。一般化された Bogoliubov 変換を拡張しゼロモードを考慮に入れ、正準交換関係を満足する扱いは奥村と山中 [17] により行われた。本研究では [17] の方法に習い、凝縮体を実数（凝縮体に流れが存在しないことに対応する）で記述される場合において、一般化された Bogoliubov 変換を用いて光学格子中に閉じ込められた中性原子 BEC のハミルトニアンに対して対角化を行った。ゼロモードを考慮に入れた BdG の方法は Lewenstein と You [18]、松本と坂本 [19] により行われた。BdG の方法は BdG 方程式の固有関数の直交性、完全性を用いてハミルトニアンに対角化を行うものである。BdG 方程式の固有値が実数の場合にはハミルトニアンは対角化され、その固有値は準粒子のエネルギースペクトルを与える。ただし凝縮体に流れがある場合に BdG 方程式を解くと固有値に複素数が現れるパラメータ領域があることが知られている [20]。そのような状況下での量子場の理論は未だ定式化されていない。ここでは BdG の方法を用いて凝縮体に流れがあり、BdG 方程式の固有値が実数の場合においてハミルトニアンに対角化を行った。次に BdG 方程式の固有値が複素数になる条件を述べた。

第4章では強結合近似を用いて解析的に問題を扱う。光学格子に閉じ込められた中性原子が光学格子の各サイトに局在している状況を解析するのに Bose-Hubbard モデルが用いられる [21]。Bose-Hubbard モデルを用いて BEC 相を扱うためには秩序変数を導入する必要がある。多くの研究では Bose-Hubbard モデルに平均場近似を用いて秩序変数を導入している [22]。平均場近似を用いることにより、GP 方程式を強結合近似したものに対応する Discrete Nonlinear Schrödinger 方程式 (DNLSE) が得られる [23]。DNLSE が従う微小な c -数場の微小な変位が満たす方程式として強結合近似のもとでの BdG 方程式が得られる。強結合近似 BdG 方程式を解き固有値を求め、その固有値を準粒子のエネルギースペクトルとして解釈するという方法が用いられる。しかし、これらの方法は c -数場のみを扱う方法となっている。秩序変数を導入し、演算子 (q -数) を用いた扱いは Oosten 等の仕事がある [24] が、Bogoliubov 近似を用いているためにゼロモードは無視されている。本研究ではゼロモードを含めた扱いを行い、強結合近似のもとで準粒子のエネルギースペクトルを求めた。その際元々のハミルトニアンが持つ大域的位相変換不変性を保つ近似になっていることを確かめるため、Ward-高橋恒等式の成立を議論した。次に凝縮体に流れがある場合に議論を拡張した。凝縮体に流れがある場合に強結合近似 BdG 方程式を解くとその固有値に複素数が

現れる。複素固有値はしばしば複素エネルギーと解釈されるが、準粒子のエネルギースペクトルはハミルトニアンを対角化したときエネルギーとしての解釈が与えられる。多くの理論では c -数場のみを扱う理論のため複素固有値にエネルギーとしての解釈が与えられるか否かは定かではない。本研究では凝縮体に流れがあり、複素固有値が現れる領域を含めた場合のハミルトニアン「対角化」を強結合近似の下で行った。この「対角化」の意味は通常のボゾン型の生成消滅演算子を用いたものとは異なる。また強結合近似の下で得られた量子場の展開と第3章で BdG の方法を用いて求めた量子場の展開を比較し、BdG 方程式の固有関数が持つ直交条件との対応を論じた。

第5章では本論文を総括し、今後の展望を述べた。

付録 A では、Hartree-Fock-Bogoliubov-Popov 近似の下で相互作用を取り入れ、強結合近似を行いハミルトニアンの対角化を行った。

2 場の量子論と中性原子気体の Bose-Einstein 凝縮

この章ではまず中性原子気体の作用を与え、場のハミルトニアンを導く。次に中性原子気体のハミルトニアンから BEC 相を記述するために“自発的対称性の破れ”の機構を導入する。自発的対称性の破れの機構により量子場の真空期待値として凝縮体を記述する秩序変数が与えられる。次にこの秩序変数が従う方程式 (Gross-Pitaevskii 方程式) を導出する。

2.1 作用、ハミルトニアン

中性原子気体を記述する作用とラグランジアン密度は、 $\Psi(x)$ を中性原子の場として、次のように仮定される。

$$S = \int d^4x \mathcal{L} \quad (1)$$

$$\mathcal{L} = \Psi^\dagger(x)(T - K - V + \mu)\Psi(x) - \frac{g}{2}\Psi^\dagger(x)\Psi^\dagger(x)\Psi(x)\Psi(x) \quad (2)$$

ここで

$$x \equiv (\mathbf{x}, t) \quad (3)$$

$$T \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (4)$$

$$K \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad (5)$$

$$V \equiv V_{\text{ex}}(\mathbf{x}) : \text{外部ポテンシャル} \quad (6)$$

であり、 m は原子の質量、 μ は化学ポテンシャルである。原子密度が希薄であることから2体の相互作用のみを考えている。中性原子の系は極低温であり低エネルギー領域を扱うことになるため、相互作用の形は散乱理論の一般論により2体の接触型相互作用に近似できる。ここで相互作

用定数は $g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$ となり、S 波散乱長 a で特徴づけられる [25]。この作用は大域的位相変換

$$\begin{aligned}\Psi(x) &\rightarrow e^{i\xi}\Psi(x) \\ \Psi^\dagger(x) &\rightarrow e^{-i\xi}\Psi^\dagger(x)\end{aligned}\tag{7}$$

に対して不変になっていることが解る。ただし、 ξ は実定数である。この位相変換に対応する次のような微小変換を考える。

$$\Psi'(x) - \Psi(x) = \xi\delta\Psi(x)\tag{8}$$

$$\delta\Psi(x) = i\Psi(x)\tag{9}$$

この微小変換に対してラグランジアン密度の変化はゼロである。

$$\delta\mathcal{L} = \mathcal{L}[\Psi'(x)] - \mathcal{L}[\Psi(x)] = 0\tag{10}$$

この対称性から Nöther の定理が成り立ち、それは次のような連続の式を意味する。

$$0 = \partial_\mu N^\mu(x)\tag{11}$$

$$N^\mu = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\Psi(x)}\delta\Psi(x)\tag{12}$$

ここで $x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (t, x, y, z)$ であり、 $N^\mu = (N^0(x), N(x))$ は変換に付随する Nöther 流である。その具体形は

$$N^0(x) = \Psi^\dagger(x)\Psi(x)\tag{13}$$

$$N(x) = \frac{i\hbar}{2m} \left([\nabla\Psi^\dagger(x)]\Psi(x) - \Psi^\dagger(x)[\nabla\Psi(x)] \right)\tag{14}$$

連続の式の両辺を空間に関して積分し無限遠方での表面項をないものとする以下式を得る。

$$\frac{d}{dt}N = 0\tag{15}$$

$$N \equiv \int d^3x N^0(x)\tag{16}$$

ここで式 (15) より、 $N = \int d^3x \Psi^\dagger(x)\Psi(x)$ は保存量であることが解る。 N は粒子数と解釈され、式 (15) は粒子数保存を表す。ただし $N = \int d^3x \Psi^\dagger(x)\Psi(x)$ は場 $\Psi(x)$ でかかれており、生成消滅演算子で表される準粒子の個数保存を表しているわけではない。ここでいう粒子数保存は Nöther 「電荷」 N であることを注意しておく。ここでラグランジアンから定義される $\Psi(x)$ の正準共役量は

$$\pi_\Psi(x) = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_0\Psi(x)} = i\hbar\Psi^\dagger(x)\tag{17}$$

である。

$\Psi(x)$ の正準共役な量 $\pi_\Psi(x)$ を用いてハミルトニアンが定義できる。

$$H = \int d^3x (\pi_\Psi(x)\Psi(x) - \mathcal{L}) = \int d^3x \mathcal{H} \quad (18)$$

$$\mathcal{H} = \Psi^\dagger(x)(K + V - \mu)\Psi(x) + \frac{g}{2}\Psi^\dagger(x)\Psi^\dagger(x)\Psi(x)\Psi(x) \quad (19)$$

$\Psi(x)$ とその正準共役な量 $\pi_\Psi(x)$ に対して次のような量子化条件を課す。

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\pi}_\Psi(\mathbf{x}', t)] = i\hbar\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (20)$$

量子化されたハミルトニアンは場の演算子 $\hat{\Psi}(x)$ を用いて次のようになる。

$$\hat{H} = \int d^3x \left[\hat{\Psi}^\dagger(x)(K + V - \mu)\hat{\Psi}(x) + \frac{g}{2}\hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}(x)\hat{\Psi}(x) \right] \quad (21)$$

正準交換関係は

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}', t)] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (22)$$

となる。このハミルトニアンから、Heisenberg の運動方程式

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(x) &= [\hat{\Psi}(x), \hat{H}] \\ &= \left(K + V - \mu + g\hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}(x) \right) \hat{\Psi}(x) \end{aligned} \quad (23)$$

を得る。この方程式を解くことができればこの系の振る舞いを記述できることになる。しかしこの方程式は非線形であり解くことは困難である。そのためハミルトニアンを非摂動部分と摂動部分に分け、相互作用描像に移る。このときハミルトニアンの非摂動部分の取り方が重要であり、非摂動部分で取られた粒子描像を準粒子と呼ぶ。相互作用の取り入れかたとしては、摂動展開、ループ展開、または平均場近似などがあるが、その際元のハミルトニアンが持つ対称性を保持するような近似を行っていくことが重要である。

2.2 自発的対称性の破れと Bose-Einstein 凝縮

量子相転移を記述するためのメカニズムとして場の量子論では“自発的対称性の破れの機構”が知られている。“自発的対称性の破れの機構”に関しては文献 [26, 27] に詳しく説明されている。自発的対称性の破れの一般的な定義は次のようなものである。系を記述するハミルトニアン（作用）がある連続変換のもとで不変であった場合、そのような変換を引き起こす母関数 $\hat{G}$ は時間に依存しない。このとき真空 $|\Omega\rangle$ の方は母関数 $\hat{G}$ を用いて $e^{i\epsilon\hat{G}/\hbar}|\Omega\rangle$ と変換を受ける。ハミルトニアンは変換に対して不変であるが、真空は変換に対して不変である場合 ($e^{i\epsilon\hat{G}/\hbar}|\Omega\rangle = |\Omega\rangle$) と不変でない場合がある ($e^{i\epsilon\hat{G}/\hbar}|\Omega\rangle \neq |\Omega\rangle$)。真空が変換に対して不変でない場合を自発的に対称性が破れた状態であるという。特に BEC で問題となる対称性の破れとは大域的位相変換対称性の破れである。通常の原子気体の系は場の定數位相の変換に関して対称であり、物理的結果は定數位相の取り方によらない。BEC 相では位相に関する対称性が自発的に破れており、位相が確定した状況が

実現される。位相が確定した状況が中性原子 BEC の系で実現していることは凝縮体の干渉の実験などで確認されている [28, 29, 30]。この小節では大域的位相変換対称性の破れについて述べ、中性原子の BEC を定式化する。

2.2.1 大域的位相変換対称性の自発的破れ

次のような Nöther の「電荷」に対応する演算子を考える。この小節の演算子は Heisenberg 描像の演算子である。

$$\hat{N}(t) = \int d^3x \hat{N}_0(x) \quad (24)$$

$$\hat{N}_0(x) = \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) \quad (25)$$

ハミルトニアンと $\hat{N}(t)$ は

$$[\hat{N}(t), \hat{H}] = 0 \quad (26)$$

であり、 $\hat{N}$ は時間に依存しない大域的演算子である。また下記のように位相変換の生成子になっている。

$$e^{i\theta \hat{N}} \hat{\Psi}(x) e^{-i\theta \hat{N}} = e^{i\theta} \hat{\Psi}(x) \quad (27)$$

式 (26) はハミルトニアンが位相変換に対して不変であることがわかる。今、選ばれた真空を $|\Omega\rangle$ と表すことにする。このとき真空 $|\Omega\rangle$ が位相変換 $e^{i\theta \hat{N}}$ に対し不変でないような場合、つまり

$$e^{i\theta \hat{N}} |\Omega\rangle \neq |\Omega\rangle \quad (28)$$

となる場合、言い換えると $\hat{N}$ が真空を消去しない場合

$$\hat{N}|\Omega\rangle \neq 0 \quad (29)$$

自発的対称性の破れが起こったと言う [27]。 $\hat{N}$ が真空を消去するなら

$$\langle \Omega | \hat{\Psi}(x) | \Omega \rangle = \langle \Omega | [\hat{\Psi}(x), \hat{N}] | \Omega \rangle = 0 \quad (30)$$

であり、場 $\hat{\Psi}(x)$ は真空期待値を持たない。逆に $\hat{N}$ が真空を消去しない時、量子場 $\hat{\Psi}(x)$ は真空期待値を持つことができる。

$$\langle \Omega | \hat{\Psi}(x, t) | \Omega \rangle = v(x) \quad (31)$$

ここでは量子場 $\hat{\Psi}(x)$ の真空期待値 $v(x)$ は時間に依存しないとした。この真空期待値が凝縮体を表す秩序変数となる。BEC における秩序変数は巨視的波動関数などとも呼ばれ、その絶対値 2 乗

は実際に観測にかかる量である。秩序変数 $v(\mathbf{x})$ は凝縮した原子の密度分布 $\rho_c(\mathbf{x})$ 、凝縮原子数 N_c と次のような関係にあると解釈する。

$$\rho_c(\mathbf{x}) = |v(\mathbf{x})|^2 \quad (32)$$

$$N_c = \int d^3x \rho_c(\mathbf{x}) = \int d^3x |v(\mathbf{x})|^2 \quad (33)$$

この秩序変数が従う方程式は GP 方程式と呼ばれる [14]。GP 方程式の導出はあとで示すが、その結果は実験をよく再現することが知られており、上述の解釈が正しいことが解る。量子場 $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ を改めて次のように書く。

$$\hat{\Psi}(\mathbf{x}) = v(\mathbf{x}) + \hat{\phi}(\mathbf{x}) \quad (34)$$

$\hat{\phi}(\mathbf{x})$ は次の関係を満たすものとする。

$$\langle \Omega | \hat{\phi}(\mathbf{x}) | \Omega \rangle = 0 \quad (35)$$

$$[\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}', t)] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (36)$$

2.2.2 Off-Diagonal Long-Range Order と自発的対称性の破れ

ここで BEC を論じる時によく用いられる Off-Diagonal Long-Range Order (ODLRO) の概念と“自発的対称性の破れの機構”の関係について触れておく。

ODLRO は Penrose と Onsager [31] そして Yang [32] によって導入された概念であり、系の非対角な長距離秩序の存在がある状態を巨視的な粒子数が占有することの判定基準になるというものである。Bose 粒子系の ODLRO を論じる場合には次のような 1 粒子密度行列を考え、適当な完全系で対角化する。

$$\begin{aligned} \rho_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}; t) &= \langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{y}, t) \rangle \\ &= \sum_i n_i \chi_i^*(\mathbf{x}, t) \chi_i(\mathbf{y}, t) \end{aligned} \quad (37)$$

ここで $\langle \dots \rangle$ は統計平均を取ることを意味している。 $\chi_i(\mathbf{x}, t)$ は 1 粒子密度行列を対角化するような 1 粒子波動関数、 n_i はその i 状態を占める粒子数と解釈される。系が ODLRO を持つということは次のように定義される。

$$|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \rightarrow \infty \quad (38)$$

$$\rho_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rightarrow n_{\max} \chi_{\max}^*(\mathbf{x}, t) \chi_{\max}(\mathbf{y}, t) \quad (39)$$

すなわち、熱力学極限を前提に、 $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \rightarrow \infty$ の極限においても 1 粒子密度行列がゼロにならない状態が存在するということである。1 粒子波動関数は $1/V^{1/2}$ (V は系のサイズ) のオーダーであるため、熱力学的極限において $n_{\max}$ は巨視的な数であることが解る。ODLRO を用いて秩序変数は $v(\mathbf{x}) = (n_{\max})^{1/2} \chi_{\max}(\mathbf{x}, t)$ と定義される。極限 $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \rightarrow \infty$ において 1 粒子密度行列は秩序変数を用いて $\rho_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}; t) \rightarrow v^*(\mathbf{x}, t) v(\mathbf{y}, t)$ と書けることが解る。

一方、自発的対称性の破れが起きた時、1粒子密度行列は式(34)より

$$\langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{y}, t) \rangle = v^*(\mathbf{x})v(\mathbf{y}) + \langle \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\phi}(\mathbf{y}, t) \rangle \quad (40)$$

となる(ただし $v(\mathbf{x})$ は時間に依存しないとした)。式(40)の第1項は熱力学極限のもとで $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \rightarrow \infty$ の極限においても消えずに残る。つまり自発的対称性の破れが起きた時に系はODRLOを必ず持つことは明らかである。つまり熱力学極限においてはODRLOも“自発的対称性の破れの機構”もBECの定義として用いることができる。

ただし、Anderson [33] や Leggett [34] が述べているように、熱力学極限と $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \rightarrow \infty$ の極限を取ることは空間的に一様な系のみで意味がある。例えば、2重井戸型ポテンシャルに閉じ込められたBECのように空間的に分離したBECを定義するには不便である[33]。熱力学極限を取らずにBECの定義を“1粒子密度行列のある固有値 $n_{\max}$ が巨視的な値を持つ”と定義することもできるが、その場合に“ $n_{\max}$ が巨視的である”という意味は曖昧なものになる[34]。また、系が非対角な長距離秩序を持つと言う意味で、秩序変数を $v(\mathbf{x}) = (n_{\max})^{1/2} \chi_{\max}(\mathbf{x}, t)$ と定義することに疑問が残る。また凝縮体の干渉の実験等により、凝縮体は位相の揃ったコヒーレントな状態であることが確認されている[28, 29, 30]が、ODLROでは巨視的な数の粒子が位相が揃ったコヒーレントな状態にあることは示せない。以上の理由から本論文では“自発的対称性の破れの機構”を用いて、秩序変数を式(31)で定義する。

2.2.3 ハミルトニアン、対称性を微小に破る項

式(34)をもとのハミルトニアンに代入し、量子場 $\hat{\phi}(\mathbf{x})$ の2次形式になっている部分を非摂動部分 $\hat{H}_0$ とし、それ以外を摂動部分 $\hat{H}_I$ と分けて以下のように書く。

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I \quad (41)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = & \int d^3x \left[\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})(K + V - \mu)\hat{\phi}(\mathbf{x}) \right. \\ & \left. + \frac{g}{2}(4|v(\mathbf{x})|^2\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x}) + v^{*2}(\mathbf{x})\hat{\phi}^2(\mathbf{x}) + v^2(\mathbf{x})\hat{\phi}^{\dagger 2}(\mathbf{x})) \right] \end{aligned} \quad (42)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_I = & \hat{H}_I^{(1)} + \hat{H}_I^{(3)} + \hat{H}_I^{(4)} \\ = & \int d^3x \left[v^*(\mathbf{x})(K + V - \mu + g|v(\mathbf{x})|^2)\hat{\phi}(\mathbf{x}) \right. \\ & + \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})(K + V - \mu + g|v(\mathbf{x})|^2)v(\mathbf{x}) \\ & + g(v(\mathbf{x})\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x}) + v^*(\mathbf{x})\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x})) \\ & \left. + \frac{g}{2}\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x}) \right] \end{aligned} \quad (43)$$

このハミルトニアンを見ると量子場 $\hat{\phi}(\mathbf{x})$ に対して

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}) \rightarrow e^{i\theta'} \hat{\phi}(\mathbf{x}) \quad \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \rightarrow e^{-i\theta'} \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \quad (44)$$

という位相変換を考えたときに不変になっていないことが解る。この様な変換を引き起こす生成子は $\hat{N}_q = \int d^3x \hat{\phi}^\dagger(x) \hat{\phi}(x)$ であり、 $\hat{N}_q$ は準粒子の個数と解釈されるものである。つまり自発的対称性の破れが起こったとき準粒子の個数 $\hat{N}_q$ は保存量ではないことが解る。2.1 節で述べたように Nöther「電荷」 $\hat{N}$ は準粒子の個数の保存を表してはいないのである。ここでは Nöther「電荷」の保存を論じなければならない。それは大域的位相変換不変性を論じることである。

自発的対称性の破れが起こり、 $\hat{N}$ が真空を消去しないとき、ギャップレスなモード（ゼロモード）が現れることが知られており、それは南部-Goldstone の定理と呼ばれている [11]。このゼロモードは大域的位相変換不変性を保障するために出てくるモードであるが、赤外発散を引き起こすため扱いが難しい。そのような問題を避けるために、作用に次のような対称性を微小に破る項

$$\Delta S = \int d^4x (\varepsilon \bar{\epsilon}) \left[v^*(\mathbf{x}) \Psi(x) + v(\mathbf{x}) \Psi^\dagger(x) \right] \quad (45)$$

を加えて議論する [39]。この項は breaking term といい対称性の破れ方を規定する役割を持つ。また $\varepsilon \bar{\epsilon}$ はゼロモードの赤外部の正則化項の役割を果たす。計算の最後で $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限を取り、元々の作用が持つ対称性を回復させる。breaking term を加えた作用 $S_\varepsilon = S + \Delta S$ から導かれるハミルトニアンに $\hat{\Psi}(x) = v(\mathbf{x}) + \hat{\phi}(x)$ を代入し、ハミルトニアンを非摂動部分と摂動部分に分けると次のようになる。

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \int d^3x \left[\hat{\phi}^\dagger(x) (K + V - \mu) \hat{\phi}(x) \right. \\ &\quad \left. + \frac{g}{2} (4|v(\mathbf{x})|^2 \hat{\phi}^\dagger(x) \hat{\phi}(x) + v^{*2}(\mathbf{x}) \hat{\phi}^2(x) + v^2(\mathbf{x}) \hat{\phi}^{\dagger 2}(x)) \right] \end{aligned} \quad (46)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_I &= \hat{H}_I^{(1)} + \hat{H}_I^{(3)} + \hat{H}_I^{(4)} \\ &= \int d^3x \left[v^*(\mathbf{x}) (K + V - \mu + g|v(\mathbf{x})|^2 - \varepsilon \bar{\epsilon}) \hat{\phi}(x) \right. \\ &\quad + \hat{\phi}^\dagger(x) (K + V - \mu + g|v(\mathbf{x})|^2 - \varepsilon \bar{\epsilon}) v(\mathbf{x}) \\ &\quad + g \left(v(\mathbf{x}) \hat{\phi}^\dagger(x) \hat{\phi}^\dagger(x) \hat{\phi}(x) + v^*(\mathbf{x}) \hat{\phi}^\dagger(x) \hat{\phi}(x) \hat{\phi}(x) \right) \\ &\quad \left. + \frac{g}{2} \hat{\phi}^\dagger(x) \hat{\phi}^\dagger(x) \hat{\phi}(x) \hat{\phi}(x) \right] \end{aligned} \quad (47)$$

通常 $\hat{N}$ は原子数 N_{atom} と解釈し、 $\langle \Omega | \hat{N} | \Omega \rangle = N_{\text{atom}}$ として Nöther「電荷」の保存を論じる。しかし場の量子論によるならば自発的対称性が破れたとき時間に依存しない大域的演算子 $\hat{N}$ は異常演算子になってしまう [26]。現に BEC の系を調べると赤外発散が現れ、 $\hat{N}$ は無限大となる。そのため $\langle \Omega | \hat{N} | \Omega \rangle = N_{\text{atom}}$ を保存量として適用することはできない。ここで論じるべきものは元々の Heisenberg 場で書かれたハミルトニアンが持つ位相変換不変性である。このような議論をするには準粒子描像の取りかたに寄らずに成り立つ恒等式が必要であり、このような恒等式の一つに Ward-高橋恒等式がある [35, 36]。このことは 4 章で論じる。

2.3 Gross-Pitaevskii 方程式

凝縮体を表す秩序変数 $v(x)$ がどのような方程式に従うかを調べる。凝縮体は GP 方程式という方程式に従うが、通常 GP 方程式は平均場近似を用いて導出される。ここでは自発的対称性の破れの機構から自己無撞着に導出する。ここで Heisenberg 場 $\hat{\phi}(x)$ に対し $\langle \Omega | \hat{\phi}(x) | \Omega \rangle = 0$ という要請を吟味する。相互作用描像に移り、演算子は非摂動部 $\hat{H}_0$ で発展し、状態は摂動部 $\hat{H}_I(t)$ にて発展するとする。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\phi}_I(x) = [\hat{\phi}_I(x), \hat{H}_0] \quad (48)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |0(t)\rangle = \hat{H}_I(t) |0(t)\rangle \quad (49)$$

$$\hat{H}_I(t) = \hat{H}_I^{(1)}(t) + \hat{H}_I^{(3)}(t) + \hat{H}_I^{(4)}(t) \quad (50)$$

ここで $|0\rangle$ は非摂動ハミルトニアンで取られる真空とし、 $|0(t)\rangle$ は相互作用描像での真空、 $|\Omega\rangle$ は Heisenberg 描像での真空とすると、それらは以下の関係にあるとする。

$$\hat{H}_0 |0\rangle = 0 \quad (51)$$

$$|0(-\infty)\rangle = |0\rangle \quad (52)$$

$$|0(t)\rangle = \hat{U}(t, -\infty) |0\rangle \quad (53)$$

$$|\Omega\rangle = \hat{U}(0, -\infty) |0\rangle \quad (54)$$

$$\hat{U}(t, -\infty) = 1 - \int_{-\infty}^t dt' \hat{H}_I(t') \hat{U}(t', -\infty) \quad (55)$$

$\langle \Omega | \hat{\phi}(x) | \Omega \rangle$ に対して以下の展開が得られる。

$$\begin{aligned} \langle \Omega | \hat{\phi}(x) | \Omega \rangle &= \frac{1}{\langle 0 | \hat{S} | 0 \rangle} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots dt_n \langle 0 | T \left(\hat{\phi}_I(x) H_I(t_1) \cdots H_I(t_n) \right) | 0 \rangle \\ \hat{S} &= \hat{U}(\infty, -\infty) \end{aligned} \quad (56)$$

$\hat{S}$ は S 行列である。 $\langle \Omega | \phi(x) | \Omega \rangle = 0$ をツリーレベル ($\hbar$ に関してゼロ次) で要請する。

$$\langle \Omega | \hat{\phi}(x) | \Omega \rangle = \frac{1}{\langle 0 | \hat{S} | 0 \rangle} \left(\frac{-i}{\hbar} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \langle 0 | T \left(\hat{\phi}_I(x) H_I^{(1)}(t_1) \right) | 0 \rangle = 0 \quad (57)$$

ここで、 $\hat{H}_I^{(1)}(t)$ は以下のようなものである。

$$H_I^{(1)}(t) = \int d^3x \left[v(x)^* h_0 \hat{\phi}_I(x) + \hat{\phi}_I^\dagger(x) h_0 v(x) \right] \quad (58)$$

$$h_0 = (K + V - \mu + g|v(x)|^2 - \varepsilon \bar{\varepsilon}) \quad (59)$$

この条件は以下のような関係式になる

$$\begin{aligned} & \langle \Omega | \hat{\phi}(x) | \Omega \rangle \\ &= \frac{-i}{\hbar} \int d^4 x_1 \left[\langle 0 | T(\hat{\phi}_I(x) \hat{\phi}_I(x_1)) | 0 \rangle h_0 v^*(x_1) + \langle 0 | T(\hat{\phi}_I(x) \hat{\phi}_I^\dagger(x_1)) | 0 \rangle h_0 v(x_1) \right] \\ &= 0 \end{aligned} \quad (60)$$

$$\begin{aligned} & \langle \Omega | \hat{\phi}^\dagger(x) | \Omega \rangle \\ &= \frac{-i}{\hbar} \int d^4 x_1 \left[\langle 0 | T(\hat{\phi}_I^\dagger(x) \hat{\phi}_I(x_1)) | 0 \rangle h_0 v^*(x_1) + \langle 0 | T(\hat{\phi}_I^\dagger(x) \hat{\phi}_I^\dagger(x_1)) | 0 \rangle h_0 v(x_1) \right] \\ &= 0 \end{aligned} \quad (61)$$

まとめて書くと

$$\begin{pmatrix} \langle \Omega | \hat{\phi}(x) | \Omega \rangle \\ \langle \Omega | \hat{\phi}^\dagger(x) | \Omega \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{11}(x, x_1; t, t_1) & G_{12}(x, x_1; t, t_1) \\ G_{21}(x, x_1; t, t_1) & G_{22}(x, x_1; t, t_1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_0 v(x_1) \\ h_0 v^*(x_1) \end{pmatrix} = 0 \quad (62)$$

となる。この式を満たすためには

$$h_0 v(x_1) = 0 \quad h_0 v^*(x_1) = 0 \quad (63)$$

でなければならない。最後に $\varepsilon \rightarrow 0$ としたとき、

$$(K + V - \mu + g|v(x)|^2) v(x) = 0 \quad (64)$$

この方程式が GP 方程式であり、凝縮体が従う方程式である。この方程式を解くことにより凝縮体の振る舞いを知ることができる。また、この方程式は $T \simeq 0$ の低温下では実験をよく再現することが解っている。

3 光学格子中の Bose-Einstein 凝縮

3.1 光学格子の概要

左右から位相のそろったレーザを打ち込むと周期的な定在波を作ることができる。これを6方向から行うことによって作られる定在波を光学格子という。中性原子気体はレーザーによる電場を感じ、光学格子中に捕捉される。実験では光学格子の他に原子気体がトラップから漏れないように更に磁場によるトラップが存在する。光学格子によるポテンシャルを $V_{\text{opt}}(x)$ 、磁場によるポテンシャルを $V_{\text{ho}}(x)$ とする。

ハミルトニアンは次のように書ける。

$$\hat{H} = \int d^3x \left[\hat{\Psi}^\dagger(x) (K + V_{\text{opt}} + V_{\text{ho}} - \mu) \hat{\Psi}(x) + \frac{g}{2} \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x) \right] \quad (65)$$

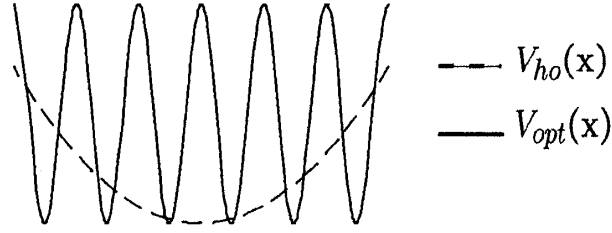


図 1: 光学格子

本研究では磁場によるポテンシャルはないものとする ($V_{ho}(\mathbf{x}) = 0$)。このことは磁気トラップが光学格子に比べ空間的に十分滑らかであるならよい近似となる。光学格子によるポテンシャルは次のようになる。

$$V_{opt}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^3 V_0 \cos^2 \left(\frac{2\pi}{d_i} x_i \right) \quad d_i: \text{格子間隔 (レーザー波長)} \quad (66)$$

3.2 光学格子中における凝縮体の振る舞い

GP 方程式

$$(K + V_{opt} + g|v(\mathbf{x})|^2 - \mu) v(\mathbf{x}) = 0 \quad (67)$$

を変形することにより、定常状態にある凝縮体は次の連続の式に従うことが解る。

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (68)$$

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im} (v^*(\mathbf{x}) \nabla v(\mathbf{x}) - v(\mathbf{x}) \nabla v^*(\mathbf{x})) \quad (69)$$

GP 方程式の解を $v(\mathbf{x}) = e^{iS(\mathbf{x})} \sqrt{n_c(\mathbf{x})}$ と書いたとき、凝縮体の密度流は

$$\mathbf{j} = n_c(\mathbf{x}) \frac{\hbar}{m} \nabla S(\mathbf{x}) \quad (70)$$

となる。密度流の形から凝縮体の速度は以下のように与えられると解釈される。

$$\mathbf{v}_s = \frac{\hbar}{m} \nabla S(\mathbf{x}) \quad (71)$$

凝縮体の位相の勾配が速度を決めることになる。

凝縮相の密度 $n_c(\mathbf{x})$ が格子間隔に対して周期的になっている場合を考える。すなわち

$$n_c(\mathbf{x} + \mathbf{G}) = n_c(\mathbf{x}) \quad \mathbf{G} = (l_x d_x, l_y d_y, l_z d_z) \quad (l_x, l_y, l_z = \text{整数} \quad d_x, d_y, d_z = \text{格子間隔}) \quad (72)$$

このとき GP 方程式は格子間隔分の推進 $\mathbf{G}$ に対して不変になるため、GP 方程式の解は以下のような Bloch 条件に従うものになる [20, 37]。

$$v(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} v_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \sqrt{n_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} + S_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}))} \quad \mathbf{k} = \left(\frac{2\pi l_x}{L_x}, \frac{2\pi l_y}{L_y}, \frac{2\pi l_z}{L_z} \right) \quad (73)$$

$$v_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{G}) = v_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (74)$$

ここで (L_x, L_y, L_z) は x, y, z 軸方向それぞれの系の大きさ ($V = L_x L_y L_z$) である。また $v_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{G}) = v_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ という条件を満たさなければならないのでこれから

$$e^{iS_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})} = e^{iS_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{G})} \quad \rightarrow \quad S_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{G}) = S_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) + 2\pi l \quad (l: \text{整数}) \quad (75)$$

という条件を $S_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ は満たさなければならない。今の場合、凝縮体の速度は

$$\mathbf{v}_s = \frac{\hbar}{m} \nabla(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + S_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})) = \frac{\hbar}{m} \left(k_x + \frac{\partial S_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})}{\partial x}, k_y + \frac{\partial S_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})}{\partial y}, k_z + \frac{\partial S_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})}{\partial z} \right) \quad (76)$$

と与えられる。ここで注意として GP 方程式は非線形の方程式であるため凝縮体の密度 $n_c(\mathbf{x})$ が周期的でないような解も存在する。本研究では $n_c(\mathbf{x})$ が周期的であり、Bloch 条件に従う GP 方程式の解のみを考える。

3.3 非摂動ハミルトニアンに対角化～準粒子描像の構築～

ここからは非摂動ハミルトニアンを対角化し準粒子とその生成消滅演算子が作用する真空を構築していく。多くの研究では最低エネルギー状態の生成消滅演算子を c -数に置き換えてしまう Bogoliubov 近似が用いられる。この方法では場の量子論の基礎である正準交換関係が明白に破れてしまう。また Bogoliubov 近似はゼロモードを考慮に入れない形式になっているが、ゼロモードは自発的対称性の破れにおいて不可欠であり、理論の自己無撞着性を満足するためには必要である。並進対称性がない場合に非摂動ハミルトニアンを対角化する方法として一般化された Bogoliubov 変換 [15] と Bogoliubov-de Gennes [16] の方法が知られている。一般化された Bogoliubov 変換を拡張しゼロモードを考慮に入れ、正準交換関係を満足する扱いは奥村と山中 [17] により行われた。またゼロモードを考慮に入れた BdG の方法は Lewenstein と You [18]、松本と坂本 [19] により行われた。秩序変数が実数の場合においては両者の同等性が証明されている [38]。この二つのアプローチの基本的な違いは自発的対称性の破れにともなう南部-Goldstone モード（ゼロモード）の取り扱いの違いにある。前者はゼロモードが通常の生成消滅演算子で記述されるのに対して [17]、後者は量子座標という量子力学的な交換関係を満たす代数が表れる [18, 19]。前者は Fock 空間で表現できるのに対して、後者は Fock 空間と結びつかずどのような“真空”状態を採用してよいのか一意的に決定できない。両者の関係は [39] で調べられている。また対角化の方法の違いとして、一般化された Bogoliubov 変換の方法ではある決められた、定計量の、正規直交完全系を満たす関数を用いて場を展開し、正準交換関係を満たすようにハミルトニアンを対角化していく。Bogoliubov-de Gennes の方法は Bogoliubov-de Gennes 方程式を用いる。Bogoliubov-de Gennes 方程式は 2 行 2 列の非エルミートな連立微分方程式であり、不定計量を用いて「ノルム」を定義する。不定計

量を用いて定まる Bogoliubov-de Gennes 方程式の解の直交性、完全性を用いて場を展開し、ハミルトニアンに代入することにより対角化を行う。次の2節では一般化された Bogoliubov 変換と Bogoliubov-de Gennes の方法を用いて非摂動ハミルトニアンの対角化を行う。

3.4 一般化された Bogoliubov 変換

ここでは $k = 0, S_k(\mathbf{x}) = 0$ の凝縮体に流れはない状況を考え、凝縮体 $v(\mathbf{x})$ は実数である場合を考える。まず次のような1体の Schrödinger 方程式を考える。

$$[K + V_{\text{opt}} - \mu + g v(\mathbf{x})^2] u_q(\mathbf{x}) = (\epsilon_q + \varepsilon \bar{\epsilon}) u_q(\mathbf{x}) \quad (77)$$

いま凝縮体の密度 $n_c(\mathbf{x}) = v^2(\mathbf{x})$ が周期的な場合を考えているので方程式の解は Bloch 条件を満たす解を持つ。

$$u_q(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \bar{u}_q(\mathbf{x}) \quad (78)$$

$$\bar{u}_q(\mathbf{x} + \mathbf{G}) = \bar{u}_q(\mathbf{x}) \quad (79)$$

この方程式の $q = 0$ の解と凝縮体の秩序変数は次の関係にある。

$$v(\mathbf{x}) = N_c^{1/2} u_0(\mathbf{x}) \quad (80)$$

$u_q(\mathbf{x})$ は次の直交性、完全性条件を満たす。

$$\int d^3x u_{q'}^*(\mathbf{x}) u_q(\mathbf{x}) = \delta_{q'q} \quad (81)$$

$$\sum_{q=-\infty}^{\infty} u_q^*(\mathbf{x}) u_q(\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (82)$$

ここで凝縮体の密度 $n_c(\mathbf{x})$ は鏡映変換対称性を持つとする。

$$n_c(\mathbf{x}) = n_c(-\mathbf{x}) \quad (83)$$

このとき方程式の対称性から次の関係式が成立する。

$$\epsilon_q = \epsilon_{-q} \quad (84)$$

$$\bar{u}_q(\mathbf{x}) = \bar{u}_{-q}^*(\mathbf{x}) \quad (85)$$

$$u_q(\mathbf{x}) = u_{-q}^*(\mathbf{x}) \quad (86)$$

式 (86) から量子場 $\hat{\phi}(\mathbf{x})$ 、 $\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})$ を次のように展開をすることができる。

$$\begin{aligned} \hat{\phi}(\mathbf{x}) &= \sum_q \hat{a}_q(t) u_q(\mathbf{x}) \\ &= \sum_q \hat{a}_{-q}(t) u_q^*(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (87)$$

$$\begin{aligned} \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) &= \sum_q \hat{a}_q^\dagger(t) u_q^*(\mathbf{x}) \\ &= \sum_q \hat{a}_{-q}^\dagger(t) u_q(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (88)$$

以下、演算子 $\hat{a}_q(t)$ 、 $\hat{a}_q^\dagger(t)$ の時間依存性は陽には表記しない。ここで非摂動ハミルトニアンを次のように表記する。

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \int d^3x \hat{\Phi}^\dagger(x) \mathcal{H}_0 \hat{\Phi}(x) \quad (89)$$

ここで

$$\mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} L & M \\ M & L \end{pmatrix} \quad (90)$$

$$\hat{\Phi}(x) = \begin{pmatrix} \hat{\phi}(x) \\ \hat{\phi}^\dagger(x) \end{pmatrix} \quad (91)$$

$$L = K + V_{\text{opt}} - \mu + 2gv^2(x) \quad (92)$$

$$M = gv^2(x) \quad (93)$$

である。ハミルトニアンに量子場の展開 (87)、(88) を代入する。

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \frac{1}{2} \int d^3x \begin{pmatrix} \hat{\phi}^\dagger(x) & \hat{\phi}(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & M \\ M & L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\phi}(x) \\ \hat{\phi}^\dagger(x) \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \int d^3x \sum_{q', q} \begin{pmatrix} \hat{a}_{q'}^\dagger u_{q'}^*(x) & \hat{a}_{-q'} u_{q'}^*(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & M \\ M & L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a}_q u_q(x) \\ \hat{a}_{-q}^\dagger u_q(x) \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{q', q} \begin{pmatrix} \hat{a}_{q'}^\dagger & \hat{a}_{-q'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{q'q} & M_{q'q} \\ M_{q'q} & L_{q'q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a}_q \\ \hat{a}_{-q}^\dagger \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{q', q} \hat{\mathbf{a}}_{q'}^\dagger \mathcal{H}_{q'q} \hat{\mathbf{a}}_q \end{aligned} \quad (94)$$

ここで

$$\mathcal{H}_{q'q} = \begin{pmatrix} L_{q'q} & M_{q'q} \\ M_{q'q} & L_{q'q} \end{pmatrix} \quad (95)$$

$$\hat{\mathbf{a}}_q = \begin{pmatrix} \hat{a}_q \\ \hat{a}_{-q}^\dagger \end{pmatrix} \quad (96)$$

$$L_{q'q} = (\epsilon_q + \epsilon_{\bar{q}}) \delta_{q'q} + M_{q'q} \quad (97)$$

$$M_{q'q} = \int d^3x g u_{q'}^*(x) v^2(x) u_q(x) \quad (98)$$

であり、 $M_{q'q}$ は次の性質を満たす。

$$M_{q'q} = M_{qq'}^* \quad (99)$$

すなわち $M_{q'q}$ はエルミート行列である。また次の性質がある。

$$M_{q'q} = M_{-q'-q}^* \quad (100)$$

ここで次のような演算子を定義する。

$$\hat{A}_q = \frac{1}{\sqrt{2(\epsilon_q + \epsilon\bar{\epsilon})}}(\hat{a}_q + \hat{a}_{-q}^\dagger) \quad (101)$$

$$\hat{B}_q = -i\sqrt{\frac{(\epsilon_q + \epsilon\bar{\epsilon})}{2}}(\hat{a}_q - \hat{a}_{-q}^\dagger) \quad (102)$$

$\hat{A}_q, \hat{B}_q$ は次の性質がある。

$$\hat{A}_q^\dagger = \hat{A}_{-q}, \quad \hat{B}_q^\dagger = \hat{B}_{-q} \quad (103)$$

交換関係は次のようになる。

$$[\hat{A}_q, \hat{B}_{q'}] = i\delta_{q-q'}, \quad [\hat{A}_q, \hat{B}_{q'}^\dagger] = i\delta_{qq'}, \quad [\hat{A}_q, \hat{A}_{q'}] = 0, \quad [\hat{B}_q, \hat{B}_{q'}] = 0 \quad (104)$$

$\hat{a}_q, \hat{a}_{-q}^\dagger$ と $\hat{A}_q, \hat{B}_{q'}$ の関係は次のように行列で表記できる。

$$\begin{pmatrix} \hat{a}_q \\ \hat{a}_{-q}^\dagger \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{(\epsilon_q + \epsilon\bar{\epsilon})} & i\sqrt{\frac{1}{(\epsilon_q + \epsilon\bar{\epsilon})}} \\ \sqrt{(\epsilon_q + \epsilon\bar{\epsilon})} & -i\sqrt{\frac{1}{(\epsilon_q + \epsilon\bar{\epsilon})}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{A}_q \\ \hat{B}_q \end{pmatrix} \quad (105)$$

ハミルトニアンに代入することにより

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \frac{1}{2} \sum_{q', q} \begin{pmatrix} \hat{A}_{q'}^\dagger & \hat{B}_{q'}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\epsilon_q + \epsilon\bar{\epsilon})^2 \delta_{q'q} + \sqrt{(\epsilon_{q'} + \epsilon\bar{\epsilon})(\epsilon_q + \epsilon\bar{\epsilon})} M_{q'q} & 0 \\ 0 & \delta_{q'q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{A}_q \\ \hat{B}_q \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{q', q} (X_{q'q} \hat{A}_{q'}^\dagger \hat{A}_q + \delta_{q'q} \hat{B}_{q'}^\dagger \hat{B}_q) \\ &= \frac{1}{2} (\hat{A}^\dagger X \hat{A} + \hat{B}^\dagger \hat{B}) \end{aligned} \quad (106)$$

と変形される。ここで

$$X_{q'q} = (\epsilon_q + \epsilon\bar{\epsilon})^2 \delta_{q'q} + \sqrt{(\epsilon_{q'} + \epsilon\bar{\epsilon})(\epsilon_q + \epsilon\bar{\epsilon})} M_{q'q} \quad (107)$$

である。 $X_{q'q}$ はエルミート行列であり、次の性質をみたす。

$$X_{q'q} = X_{qq'}^*, \quad X_{q'q} = X_{-q'-q}^* \quad (108)$$

エルミート行列 X を対角化するようなユニタリー行列を考える。

$$OO^\dagger = O^\dagger O = I \quad \left(\sum_{q_1} O_{q'q_1} O_{qq_1}^* = \sum_{q_1} O_{q_1q'}^* O_{q_1q} = \delta_{q'q} \right) \quad (109)$$

$$OXO^\dagger = E^2 \quad \left(\sum_{q_1, q_2} O_{q'q_1} X_{q_1q_2} O_{qq_2}^* = \delta_{q'q} E_q^2 \right) \quad (110)$$

対角化された行列 E^2 は実行列である。また $E_q^2 > 0$ を仮定する。ここで次のような行列を定義する。

$$\rho_{q'q} = \delta_{q'-q} \quad (111)$$

この行列は添え字 q に対して $q \rightarrow -q$ のような置換を施すことができる。ここで

$$(\rho X \rho)_{q'q} = \sum_{q_1, q_2} \delta_{q'-q_1} X_{q_1 q_2} \delta_{q_2 - q} = X_{-q' - q} = X_{q'q}^* \quad (112)$$

より

$$(\rho X \rho) = X^* \quad (113)$$

である。式 (110) の複素共役を考える。

$$\begin{aligned} O^* X^* O^{\dagger} &= O^* \rho (\rho X^* \rho) \rho O^{\dagger} \\ &= (O^* \rho) X (O^* \rho)^{\dagger} \\ &= E^2 \end{aligned} \quad (114)$$

このことから次のことが言える。

$$O^* \rho = O \quad (115)$$

$$\sum_{q_1} O_{q'q_1}^* \delta_{q_1 - q} = O_{q' - q}^* = O_{q'q} \quad (116)$$

このユニタリー行列を用いて $\hat{A}_q$ 、 $\hat{B}_q$ を変換する

$$\hat{Q} = O \hat{A}, \quad \hat{Q}_q = \sum_{q_1} O_{qq_1} \hat{A}_{q_1} \quad (117)$$

$$\hat{P} = O \hat{B}, \quad \hat{P}_q = \sum_{q_1} O_{qq_1} \hat{B}_{q_1} \quad (118)$$

ここで

$$\begin{aligned} \hat{Q}_q^{\dagger} &= \sum_{q_1} O_{qq_1}^* \hat{A}_{q_1}^{\dagger} = \sum_{q_1} O_{q - q_1} \hat{A}_{-q_1} \\ &= \sum_{q'_1} O_{qq'_1} \hat{A}_{q'_1} = \hat{Q}_q \end{aligned} \quad (119)$$

すなわち $\hat{Q}_q$ はエルミート演算子である。ここで性質 $O_{q' - q}^* = O_{q'q}$ と $\hat{A}_{q_1}^{\dagger} = \hat{A}_{-q_1}$ 、また $q_1 = -q'_1$ という置き換えを行った。同様にして

$$\begin{aligned} \hat{P}_q^{\dagger} &= \sum_{q_1} O_{qq_1}^* \hat{B}_{q_1}^{\dagger} = \sum_{q_1} O_{q - q_1} \hat{B}_{-q_1} \\ &= \sum_{q'_1} O_{qq'_1} \hat{B}_{q'_1} = \hat{P}_q \end{aligned} \quad (120)$$

$\hat{P}_q$ はエルミート演算子である。 $\hat{Q}_q$ と $\hat{P}_q$ の交換関係は

$$\begin{aligned}
 [\hat{Q}_q, \hat{P}_{q'}] &= \sum_{q_1, q_2} O_{qq_1} O_{q'q_2} [\hat{A}_{q_1}, \hat{B}_{q_2}] \\
 &= i \sum_{q_1, q_2} O_{qq_1} O_{q'q_2} \delta_{q_1 - q_2} \\
 &= i \sum_{q_1} O_{qq_1} O_{q' - q_1} \\
 &= i \sum_{q_1} O_{qq_1} O_{q'q_1}^* \\
 &= i \delta_{qq'}
 \end{aligned} \tag{121}$$

であり、また $[\hat{A}_{q_1}, \hat{A}_{q_2}] = 0$ 、 $[\hat{B}_{q_1}, \hat{B}_{q_2}] = 0$ より

$$[\hat{Q}_q, \hat{Q}_{q'}] = \sum_{q_1, q_2} O_{qq_1} O_{q'q_2} [\hat{A}_{q_1}, \hat{A}_{q_2}] = 0 \tag{122}$$

$$[\hat{P}_q, \hat{P}_{q'}] = \sum_{q_1, q_2} O_{qq_1} O_{q'q_2} [\hat{B}_{q_1}, \hat{B}_{q_2}] = 0 \tag{123}$$

これらの交換関係から $\hat{Q}_q$ と $\hat{P}_q$ は正準座標と正準運動量の関係にあることが解る。ハミルトニアンは次のようになる。

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \sum_q \left(E_q^2 \hat{Q}_q^2 + \hat{P}_q^2 \right) \tag{124}$$

調和振動子の形に帰着された。 $\hat{Q}_q$ と $\hat{P}_q$ を用いて次のような演算子を定義する。

$$\hat{b}_q = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\sqrt{E_q} \hat{Q}_q + \frac{i}{\sqrt{E_q}} \hat{P}_q \right) \tag{125}$$

$$\hat{b}_q^\dagger = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\sqrt{E_q} \hat{Q}_q - \frac{i}{\sqrt{E_q}} \hat{P}_q \right) \tag{126}$$

この演算子は生成消滅演算子の交換関係

$$[\hat{b}_q, \hat{b}_{q'}^\dagger] = \delta_{qq'}, \quad [\hat{b}_q, \hat{b}_{q'}] = 0 \tag{127}$$

を満たす。ハミルトニアンは

$$\hat{H}_0 = \sum_q \left(E_q \hat{b}_q^\dagger \hat{b}_q + \frac{E_q}{2} \right) \tag{128}$$

と対角化された。 $\hat{a}_q$ と $\hat{b}_q$ は次のような変換でつながっている。

$$\hat{b}_q = \sum_{q_1} \left(C_{qq_1} \hat{a}_{q_1} + S_{qq_1} \hat{a}_{-q_1}^\dagger \right) \tag{129}$$

$$\hat{a}_q = \sum_{q_1} \left(C_{q_1 q}^* \hat{b}_{q_1} + S_{q_1 q}^* \hat{b}_{q_1}^\dagger \right) \quad (130)$$

$$C_{qq_1} = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{E_q}{(\epsilon_{q_1} + \epsilon \bar{\epsilon})}} + \sqrt{\frac{(\epsilon_{q_1} + \epsilon \bar{\epsilon})}{E_q}} \right) O_{qq_1} \quad (131)$$

$$S_{qq_1} = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{E_q}{(\epsilon_{q_1} + \epsilon \bar{\epsilon})}} - \sqrt{\frac{(\epsilon_{q_1} + \epsilon \bar{\epsilon})}{E_q}} \right) O_{qq_1} \quad (132)$$

ここで C_{qq_1} 、 S_{qq_1} は次の関係式を満たす。

$$\sum_{q_1} (C_{q_1 q}^* C_{q_1 q'} - S_{q_1 q}^* S_{q_1 q'}) = \delta_{qq'} \quad (133)$$

$$\sum_{q_1} (C_{q_1 q} S_{q_1 q'} - S_{q_1 q} C_{q_1 q'}) = 0 \quad (134)$$

これらの量を用いて、量子場 $\hat{\phi}(x)$ は次のように展開される。

$$\hat{\phi}(x) = \sum_{q, q_1} \left(C_{q_1 q}^* \hat{b}_{q_1} + S_{q_1 q}^* \hat{b}_{q_1}^\dagger \right) u_q(x) \quad (135)$$

$$\hat{\phi}^\dagger(x) = \sum_{q, q_1} \left(C_{q_1 q} \hat{b}_{q_1}^\dagger + S_{q_1 q} \hat{b}_{q_1} \right) u_q^*(x) \quad (136)$$

この量子場の展開は正準交換関係

$$[\hat{\phi}(x, t), \hat{\phi}^\dagger(x', t)] = \delta(x - x') \quad (137)$$

$$[\hat{\phi}(x, t), \hat{\phi}(x', t)] = [\hat{\phi}^\dagger(x, t), \hat{\phi}^\dagger(x', t)] = 0 \quad (138)$$

を満足するものになっている。ここで式 (82)、(133)、(134) を用いた。

3.5 Bogoliubov-de Gennes の方法

この節では非摂動ハミルトニアンを対角化するにあたり Bogoliubov-de Gennes (BdG) の方法を用いることにする。この方法では BdG 方程式を解き、その解の直交性、完全性を用いて非摂動ハミルトニアンを対角化する。BdG の方法ではゼロモードを量子座標として扱うことになる。BdG の方法では凝縮体に流れがあり、秩序変数が複素数になる場合への拡張も容易にできる。ただし凝縮体に流れがある場合には BdG 方程式の固有値が複素固有値が現れる場合がある。複素固有値が現れる状況は dynamical instability と呼ばれ、光学格子中の BEC、多重渦度の量子渦を持つ BEC の系に現れることが知られている [20, 40]。dynamical instability は凝縮体の不安定性に関係するものと解釈されている。また光学格子において凝縮体の流れの速度を上げていくと、まず Landau instability が現れ、次に dynamical instability が現れることが解っている [20, 41]。このような状況下での量子場の理論は定式化されていない。この節ではまず実固有値のみが存在する場合においてハミルトニアンの対角化を行う。その後複素固有値の出現の条件について述べる。

3.5.1 Bogoliubov-de Gennes 方程式

相互作用描像での量子場の時間発展は以下ようになる

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\phi}(x) = \left[K + V_{\text{opt}} - \mu + 2g|v(x)|^2 \right] \hat{\phi}(x) + gv^2(x) \hat{\phi}^\dagger(x) \quad (139)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\phi}^\dagger(x) = \left[K + V_{\text{opt}} - \mu + 2g|v(x)|^2 \right] \hat{\phi}^\dagger(x) + gv^{*2}(x) \hat{\phi}(x) \quad (140)$$

ここで分割された場を

$$\hat{\Psi}(x) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} (v_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) + \hat{\phi}_{\mathbf{k}}(x)) \quad (141)$$

と定義し直す。 $\hat{\phi}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, t)$ は以下の交換関係を満たすとする。

$$[\hat{\phi}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, t), \hat{\phi}_{\mathbf{k}'}^\dagger(\mathbf{x}', t)] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (142)$$

$\hat{\phi}(x) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \hat{\phi}_{\mathbf{k}}(x)$ を代入すると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\phi}_{\mathbf{k}}(x) = L(\mathbf{k}) \hat{\phi}_{\mathbf{k}}(x) + M_{\mathbf{k}} \hat{\phi}_{\mathbf{k}}^\dagger(x) \quad (143)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\phi}_{\mathbf{k}}^\dagger(x) = L(-\mathbf{k}) \hat{\phi}_{\mathbf{k}}^\dagger(x) + M_{\mathbf{k}}^* \hat{\phi}_{\mathbf{k}}(x) \quad (144)$$

となり、ここで

$$L(\mathbf{k}) = K(\mathbf{k}) + V_{\text{opt}} - \mu + 2g|v_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})|^2 \quad (145)$$

$$K(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla + i\mathbf{k})^2 \quad (146)$$

$$M_{\mathbf{k}} = gv_{\mathbf{k}}^2(\mathbf{x}) \quad (147)$$

である。 $L(\mathbf{k})$ は次のような性質をもつ。

$$L^*(\mathbf{k}) = L(-\mathbf{k}) \quad (148)$$

である。行列形式で書くと

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \hat{\phi}_{\mathbf{k}}(x) \\ \hat{\phi}_{\mathbf{k}}^\dagger(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L(\mathbf{k}) & M_{\mathbf{k}} \\ -M_{\mathbf{k}}^* & -L^*(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\phi}_{\mathbf{k}}(x) \\ \hat{\phi}_{\mathbf{k}}^\dagger(x) \end{pmatrix} \quad (149)$$

となる。ここで次のような固有値問題を考える。

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} f_{\mathbf{k}}(x) \\ g_{\mathbf{k}}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L(\mathbf{k}) & M_{\mathbf{k}} \\ -M_{\mathbf{k}}^* & -L^*(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{\mathbf{k}}(x) \\ g_{\mathbf{k}}(x) \end{pmatrix} \quad (150)$$

この方程式が Bogoliubov-de Gennes 方程式である。この方程式の解の直交性、完全性を用いることによって非摂動ハミルトニアンを対角化することができる。この BdG 方程式はポテンシャルの周期性、 $v_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{G}) = v_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ という凝縮体への Bloch 条件から $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \mathbf{G}$ という格子間隔分の並進に対して不変となる。したがって解は以下のような Bloch 条件を満たす。

$$\begin{pmatrix} f_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x}) \\ g_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \begin{pmatrix} \bar{f}_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x}) \\ \bar{g}_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (151)$$

$$\begin{pmatrix} \bar{f}_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x} + \mathbf{G}) \\ \bar{g}_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x} + \mathbf{G}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{f}_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x}) \\ \bar{g}_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (152)$$

この事から BdG 方程式は以下のようにも書ける

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}q} \begin{pmatrix} \bar{f}_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x}) \\ \bar{g}_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) & M_{\mathbf{k}} \\ -M_{\mathbf{k}}^* & -L(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{f}_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x}) \\ \bar{g}_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (153)$$

3.5.2 解の直交性、ゼロモード、完全性

BdG 方程式を以下次のように簡単に表記する。

$$T \mathbf{y}_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x}) = \hbar\omega_{\mathbf{k}q} \mathbf{y}_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x}) \quad (154)$$

$$T = \begin{pmatrix} L(\mathbf{k}) & M_{\mathbf{k}} \\ -M_{\mathbf{k}}^* & -L^*(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (155)$$

$$\mathbf{y}_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \bar{f}_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x}) \\ e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \bar{g}_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (156)$$

BdG の固有値が全て実数の場合を考える。BdG 方程式の持つ対称性から次のことが言える。BdG 方程式が固有値 $\hbar\omega_{\mathbf{k}q}$ を持つ解 $\mathbf{y}_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x})$ がある場合、固有値 $-\hbar\omega_{\mathbf{k}q}$ を持つ解 $\mathbf{z}_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x})$ が存在し次のようになる。

$$\mathbf{z}_{\mathbf{k}q}(\mathbf{x}) = \rho_1 \mathbf{y}_{\mathbf{k}q}^*(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \bar{g}_{\mathbf{k}q}^*(\mathbf{x}) \\ e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \bar{f}_{\mathbf{k}q}^*(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (157)$$

ここで ρ_1 はパウリ行列の第 1 成分である。以後、本論文では ρ_i は第 i パウリ行列を意味することにする。この性質は次のようにして示せる。まず BdG 方程式は次のような対称性を持つ

$$\rho_1 T^* \rho_1 = -T \quad (158)$$

BdG 方程式の複素共役 $\hbar\omega_{\mathbf{k}q} \mathbf{y}_{\mathbf{k}q}^*(\mathbf{x}) = T^* \mathbf{y}_{\mathbf{k}q}^*(\mathbf{x})$ を考え左辺から ρ_1 を掛けることにより

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}q} \rho_1 \mathbf{y}_{\mathbf{k}q}^*(\mathbf{x}) = T^* \mathbf{y}_{\mathbf{k}q}^*(\mathbf{x}) = \rho_1 T^* \rho_1 \mathbf{y}_{\mathbf{k}q}^*(\mathbf{x}) \quad (159)$$

ここで (158) を用いると

$$-\hbar\omega_{\mathbf{k}q} (\rho_1 \mathbf{y}_{\mathbf{k}q}^*(\mathbf{x})) = T (\rho_1 \mathbf{y}_{\mathbf{k}q}^*(\mathbf{x})) \quad (160)$$

よって固有値 $-\hbar\omega_{kq}$ を持つ解は $\rho_1 y_{kq}(x)$ である。

ここで doublet

$$\mathbf{r}(x) = \begin{pmatrix} r_1(x) \\ r_2(x) \end{pmatrix} \quad \mathbf{s}(x) = \begin{pmatrix} s_1(x) \\ s_2(x) \end{pmatrix} \quad (161)$$

に対して次のような「内積」を定義する。

$$(\mathbf{s}(x), \mathbf{r}(x)) = \int d^3x \begin{pmatrix} s_1^*(x) & s_2^*(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1(x) \\ r_2(x) \end{pmatrix} \quad (162)$$

また、いま定義した「内積」を用いて doublet $\mathbf{r}(x)$ の「ノルム」を次のように定義する。

$$\|\mathbf{r}(x)\|^2 = (\mathbf{r}(x), \mathbf{r}(x)) \quad (163)$$

$$= \int d^3x (|r_1(x)|^2 - |r_2(x)|^2) \quad (164)$$

この「ノルム」は正にも負にもなり、またゼロにもなるものであることに注意しておく。BdG の方法では以上のような不定計量を用いて理論を構築していく。

「内積」を用いて、BdG 方程式の解 $y_{kq}, y_{kq'}$ の直交関係を調べていく。それらの「内積」を計算すると

$$\begin{aligned} (y_{kq'}(x), T y_{kq}(x)) &= \hbar\omega_{kq}(y_{kq'}(x), y_{kq}(x)) \\ &= (T y_{kq'}(x), y_{kq}(x)) \\ &= \hbar\omega_{kq'}(y_{kq'}(x), y_{kq}(x)) \end{aligned} \quad (165)$$

ここで $(y_{kq'}(x), T y_{kq}(x)) = (T y_{kq'}(x), y_{kq}(x))$ の関係式は部分積分を使用した。以上から次の関係式が導ける。

$$(\hbar\omega_{kq} - \hbar\omega_{kq'})(y_{kq'}(x), y_{kq}(x)) = 0 \quad (166)$$

「ノルム」を1と規格化したとして、次の直交関係が導ける。

$$\begin{aligned} \delta_{qq'} &= (y_{kq'}(x), y_{kq}(x)) \\ &= \int d^3x e^{i(q-q') \cdot x} [f_{kq}(x) f_{kq'}^*(x) - g_{kq}(x) g_{kq'}^*(x)] \end{aligned} \quad (167)$$

$-\hbar\omega_{kq}$ を持つような解 $z_{kq}(x), z_{kq'}(x)$ に対しては $(z_{kq'}(x), z_{kq}(x)) = -(y_{kq'}(x), y_{kq}(x))$ があるので直交関係は

$$(z_{kq'}(x), z_{kq}(x)) = -\delta_{qq'} \quad (168)$$

となる。 $z_{kq'}(x)$ と $y_{kq}(x)$ 間の直交関係を考える。

$$\begin{aligned} (z_{kq'}(x), T y_{kq}(x)) &= \hbar\omega_{kq}(y_{kq'}(x), z_{kq}(x)) \\ &= (T y_{kq'}(x), z_{kq}(x)) \\ &= -\hbar\omega_{kq'}(z_{kq'}(x), y_{kq}(x)) \end{aligned} \quad (169)$$

このことから次の関係式が導ける。

$$(\hbar\omega_{kq} + \hbar\omega_{kq'})(z_{kq'}(x), y_{kq}(x)) = 0 \quad (170)$$

この関係式から直交関係は

$$\begin{aligned} 0 &= (z_{kq'}(x), y_{kq}(x)) \\ &= \int d^3x e^{i(q+q') \cdot x} [f_{kq}(x)g_{kq'}(x) - g_{kq}(x)f_{kq'}(x)] \end{aligned} \quad (171)$$

となる。ここで BdG 方程式

$$Ty_{kq}(x) = \hbar\omega_{kq}y_{kq}(x) \quad (172)$$

において $\hbar\omega_{kq} = 0$ になる解が存在する。そのような解は

$$v_k(x) = \begin{pmatrix} v_k(x) \\ -v_k^*(x) \end{pmatrix} \quad (173)$$

であり、このとき BdG 方程式は GP 方程式

$$Lv(x) + gv(x)^2v^*(x) = 0 \quad (174)$$

$$v(x) = e^{ik \cdot x} v_k(x) \quad (175)$$

と一致する。BdG 方程式は 2 行 2 列の連立微分方程式であるが、 $\hbar\omega_{kq} = 0$ の解を持つ場合は 1 本の方程式になってしまうため、 $v_k(x)$ だけでは BdG 方程式の完全系を張ることができない。そこで次の方程式を導入する [19]。

$$Tu_k(x) = v_k(x) \quad (176)$$

$$u_k(x) = \begin{pmatrix} u_k(x) \\ u_k^*(x) \end{pmatrix} \quad (177)$$

ゼロモード間での直交関係を調べていく。まず $v_k(x)$ 自身の「ノルム」は

$$(v_k(x), v_k(x)) = 0 \quad (178)$$

次に u_k 自身の「ノルム」は

$$(u_k(x), u_k(x)) = 0 \quad (179)$$

となる。このことからゼロモードに関する解はゼロノルムであることが解る。ここで $v_k(x)$ と $u_k(x)$ の内積は直交しない。ここでは

$$\begin{aligned} (u_k(x), v_k(x)) &= \int d^3x [u_k^*(x)v_k(x) + u_k(x)v_k^*(x)] \\ &= I \end{aligned} \quad (180)$$

としておく。 $v_k(x)$ と他のモードとの直交関係は

$$(v_k(x), T y_{kq}(x)) = \hbar \omega_{kq} (v_k(x), y_{kq}(x)) = 0 \quad (181)$$

より

$$(v_k(x), y_{kq}(x)) = \int d^3x e^{iq \cdot x} [v_k^*(x) f_{kq}(x) + v_k(x) g_{kq}(x)] = 0 \quad (182)$$

となる。 $u_k(x)$ と他のモードとの直交関係は

$$\begin{aligned} (u_k(x), T y_{kq}(x)) &= \hbar \omega_{kq} (u_k(x), y_{kq}(x)) \\ &= (T u_k(x), y_{kq}(x)) = \hbar \omega_{kq} (u_k(x), y_{kq}(x)) = 0 \end{aligned} \quad (183)$$

より

$$(u_k(x), y_{kq}(x)) = \int d^3x e^{iq \cdot x} [u_k^*(x) f_{kq}(x) - u_k(x) g_{kq}(x)] = 0 \quad (184)$$

となり、他のモードとは直交している。直交関係についてまとめておく

$$(y_{kq'}(x), y_{kq}(x)) = \delta_{qq'} \quad (z_{kq'}(x), z_{kq}(x)) = -\delta_{qq'} \quad (185)$$

$$(z_{kq'}(x), y_{kq}(x)) = 0, \quad (v_k(x), v_k(x)) = 0 \quad (186)$$

$$(v_k(x), y_{kq}(x)) = 0, \quad (v_k(x), z_{kq}(x)) = 0 \quad (187)$$

$$(u_k(x), u_k(x)) = 0, \quad (u_k(x), y_{kq}(x)) = 0 \quad (188)$$

$$(u_k(x), z_{kq}(x)) = 0, \quad (u_k(x), v_k(x)) = I \quad (189)$$

BdG 方程式の解の完全性として次のものを採用する。

$$\begin{aligned} &\sum_{q \neq 0} [y_{kq}(x) y_{kq}^\dagger(x') - z_{kq}(x) z_{kq}^\dagger(x')] \\ &+ \frac{1}{I} [v_k(x) u_k^\dagger(x') + u_k(x) v_k^\dagger(x')] = \rho_3 \delta(x - x') \end{aligned} \quad (190)$$

具体的には

$$\begin{aligned} &\sum_{q \neq 0} [e^{iq \cdot (x-x')} f_{kq}(x) f_{kq}^*(x') - e^{iq \cdot (x'-x)} g_{kq}^*(x) g_{kq}(x')] \\ &+ \frac{1}{I} [v_k(x) u_k^*(x') + u_k(x) v_k^*(x')] = \delta(x - x') \end{aligned} \quad (191)$$

$$\begin{aligned} &\sum_{q \neq 0} [e^{iq \cdot (x-x')} f_{kq}(x) g_{kq}^*(x') - e^{iq \cdot (x'-x)} g_{kq}^*(x) f_{kq}(x')] \\ &- \frac{1}{I} [v_k(x) u_k(x') - u_k(x) v_k(x')] = 0 \end{aligned} \quad (192)$$

この完全性の条件を用いて場 $\hat{\phi}_k(x)$ を展開すると

$$\hat{\Phi}_k(x) = -i\hat{Q}(t)v_k(x) + \frac{\hat{P}(t)}{I}u_k(x) + \sum_{q \neq 0} y_{kq}(x)\hat{a}_{kq}(t) + z_{kq}(x)\hat{a}_{kq}^\dagger(t) \quad (193)$$

ここで

$$\hat{\Phi}_k(x) = \begin{pmatrix} \hat{\phi}_k(x) \\ \hat{\phi}_k^\dagger(x) \end{pmatrix} \quad (194)$$

である。具体的には以下のようなになる。

$$\hat{\phi}_k(x) = -i\hat{Q}(t)v_k(x) + \frac{\hat{P}(t)}{I}u_k(x) + \sum_{q \neq 0} [e^{iq \cdot x} f_{kq}(x) \hat{a}_{kq}(t) + e^{-iq \cdot x} g_{kq}^*(x) \hat{a}_{kq}^\dagger(t)] \quad (195)$$

ここで $\hat{Q}(t), \hat{P}(t), \hat{a}_{kq}(t), \hat{a}_{kq}^\dagger$ は以下のような交換関係をみたしているとする。

$$[\hat{a}_{kq}(t), \hat{a}_{kq'}^\dagger(t)] = \delta_{qq'} \quad (196)$$

$$[\hat{a}_{kq}(t), \hat{a}_{kq'}(t)] = 0 \quad (197)$$

$$[\hat{Q}(t), \hat{P}(t)] = i \quad (198)$$

このような交換関係を考えると正準交換関係

$$[\hat{\phi}_k(x, t), \hat{\phi}_k^\dagger(x', t)] = \delta(x - x') \quad (199)$$

$$[\hat{\phi}_k(x, t), \hat{\phi}_k(x', t)] = [\hat{\phi}_k^\dagger(x, t), \hat{\phi}_k^\dagger(x', t)] = 0 \quad (200)$$

を満足する。ゼロモードに対応する演算子 $\hat{Q}(t), \hat{P}(t)$ を量子座標と呼ぶ [19]。

3.5.3 ハミルトニアンに対角化

非摂動ハミルトニアンを次のように表記する。

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \int d^3x \hat{\Phi}_k^\dagger(x) \rho_3 T \hat{\Phi}_k(x) \quad (201)$$

非摂動ハミルトニアンに式 (193) を代入すると

$$\begin{aligned} 2\hat{H}_0 = & \hat{Q}^2(v_k, Tv_k) + \left(\frac{\hat{P}}{I}\right)^2 (u_k, Tu_k) + i\frac{\hat{P}\hat{Q}}{I}(v_k, Tu_k) - i\frac{\hat{Q}\hat{P}}{I}(u_k, Tv_k) \\ & + \sum_{q \neq 0} \left(i\hat{Q}\hat{a}_{kq}(v_k, Ty_{kq}) + i\hat{Q}\hat{a}_{kq}^\dagger(v_k, Tz_{kq}) + \frac{\hat{P}}{I}\hat{a}_{kq}(u_k, Ty_{kq}) + \frac{\hat{P}}{I}\hat{a}_{kq}^\dagger(u_k, Tz_{kq}) \right) \\ & + \sum_{q' \neq 0} \left(\hat{a}_{kq'}^\dagger \frac{\hat{P}}{I}(y_{kq'}, Tu_k) - i\hat{a}_{kq'}^\dagger \hat{Q}(y_{kq'}, Tv_k) + \hat{a}_{kq'} \frac{\hat{P}}{I}(z_{kq'}, Tu_k) - i\hat{a}_{kq'} \hat{Q}(z_{kq'}, Tv_k) \right) \\ & + \sum_{q, q'} \left(\hat{a}_{kq'}^\dagger \hat{a}_{kq}(y_{kq'}, Ty_{kq}) + \hat{a}_{kq'}^\dagger \hat{a}_{kq}^\dagger(z_{kq'}, Tz_{kq}) \right. \\ & \quad \left. + \hat{a}_{kq'}^\dagger \hat{a}_{kq}^\dagger(y_{kq'}, Tz_{kq}) + \hat{a}_{kq'} \hat{a}_{kq}(z_{kq'}, Ty_{kq}) \right) \end{aligned} \quad (202)$$

直交関係 (185)～(189) を用いることでハミルトニアンは以下のように対角化される。

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2I} \hat{P}^2 + \sum_{q \neq 0} \hbar \omega_{kq} \hat{a}_{kq}^\dagger \hat{a}_{kq} + (\text{定数}) \quad (203)$$

ゼロモードは量子座標としてハミルトニアンに現れていることが解る。ハミルトニアンを見れば解るが量子座標は調和振動子の代数と関連付けられないため Fock 空間上では表現できない。したがってゼロモードに関する状態は Fock 空間の真空 $|0\rangle$ でなく量子力学的な状態 $|\Psi\rangle$ となることになる。また BdG 方程式の固有値はハミルトニアンを対角化したとき初めてエネルギーという解釈が成り立つ。BdG 方程式の解には $\hbar \omega_{kq}$ と $-\hbar \omega_{kq}$ を持つものが存在する。つまり固有値は $-\infty$ から ∞ まで変化する。しかしハミルトニアンに現れるのは $\hbar \omega_{kq}$ のみであり下に有界になる。ただし複素固有値が現れた場合の議論は自明ではない。次に相互作用描像での時間発展を求めておく

$$i\hbar \frac{d\hat{a}_{kq}(t)}{dt} = [\hat{a}_{kq}(t), H_0] \rightarrow \hat{a}_{kq}(t) = e^{-i\omega_{kq}t} \hat{a}_{kq} \quad (204)$$

$$i\hbar \frac{d\hat{P}(t)}{dt} = [\hat{P}(t), H_0] = 0 \rightarrow \hat{P}(t) = \hat{P} \quad (205)$$

$$i\hbar \frac{d\hat{Q}(t)}{dt} = [\hat{Q}(t), \hat{H}_0] = \frac{i\hbar}{I} \hat{P}(t) \rightarrow \hat{Q}(t) = \hat{Q} + \frac{\hat{P}}{I} t \quad (206)$$

時間発展も含めて場 $\hat{\phi}_k(x)$ は次のように展開されていることになる。

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_k(x) = & -i \left(\hat{Q} + \frac{\hat{P}}{I} t \right) v_k(x) + \frac{\hat{P}}{I} u_k(x) \\ & + \sum_{q \neq 0} [e^{iq \cdot x} f_{kq}(x) e^{-i\omega_{kq}t} \hat{a}_{kq} + e^{-iq \cdot x} g_{kq}^*(x) e^{i\omega_{kq}t} \hat{a}_{kq}^\dagger] \end{aligned} \quad (207)$$

3.5.4 複素固有値

今までの議論では BdG 方程式の固有値は全て実数であると仮定してきた。ここでは BdG 方程式の固有値が複素数になる場合について触れる [43]。BdG 方程式の固有値 $\hbar \omega_{kq}$ が複素数も許すと考えた場合の BdG 方程式の解の直交関係を考えていく。その場合、式 (166) は次のようになる。

$$(\hbar \omega_{kq}^* - \hbar \omega_{kq'})(y_{kq'}(x), y_{kq}(x)) = 0 \quad (208)$$

ここで $q' = q$ のとき固有値が実数ならば $\hbar \omega_{kq}^* = \hbar \omega_{kq}$ のため $(y_{kq}(x), y_{kq}(x)) = 1$ と置くことができた。しかし $\hbar \omega_{kq}$ が複素数の場合 $\hbar \omega_{kq}^* \neq \hbar \omega_{kq}$ であるため、「ノルム」は

$$(y_{kq}(x), y_{kq}(x)) = 0 \quad (209)$$

となる。つまり複素固有値が出現する場合には必ずゼロノルムとなることが解る。次に $q' \neq q$ のとき

$$\hbar \omega_{kq}^* = \hbar \omega_{kq'} \quad (210)$$

となるような解が存在する場合 $y_{kq'}(\mathbf{x})$ と $y_{kq}(\mathbf{x})$ 間の直交関係が成り立たず。

$$(y_{kq'}(\mathbf{x}), y_{kq}(\mathbf{x})) = (\text{定数}) \quad (211)$$

となる。BdG 方程式の固有値が実の場合は、その固有値は準粒子のエネルギースペクトルとなる。複素固有値が準粒子のエネルギースペクトルとしての解釈が与えられるか否かは定かではない。この議論は第4章5節で強結合近似を行うことにより、解析的に扱える問題を用いて議論する。

4 光学格子中の強結合近似

この章では光学格子によるポテンシャル $V_{\text{opt}}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^3 V_0 \cos\left(\frac{2\pi}{a_i} x_i\right)$ の V_0 が大きく粒子が光学格子の各サイトに局在しているような状況を考える。 V_0 を大きくしポテンシャルの深さを変えていくことにより BEC 相から Mott 絶縁体相への超流動絶縁体転移が起こることが確認されている [12]。このような現象を解析するのによく Bose-Hubbard モデルが用いられる [21]。この章では非摂動ハミルトニアン (46) に対して強結合近似を行うことにより、問題を解析的に扱い非摂動ハミルトニアンを対角化し準粒子描像を得る。また強結合近似のもとで得た準粒子描像が大域的位相変換不変性を保持したのになっているかを確かめるため Ward-高橋恒等式の成立を確かめる。その後、この枠組みを凝縮体に流れがある状況に拡張する。

4.1 Bose-Hubbard モデルと Bose-Einstein 凝縮の取り扱い

原子が光学格子の各サイトに局在しているような状況を記述するのによく Bose-Hubbard モデルが用いられる。まず中性原子場のハミルトニアンが与えられる。

$$\hat{H} = \int d^3x \left[\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) (K + V_{\text{opt}} - \mu) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) + \frac{g}{2} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \right] \quad (212)$$

場 $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ をある Wannier 関数 $w^{(n)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ を用いて展開する。

$$\hat{\Psi}(\mathbf{x}) = \sum_{n,i} \hat{a}_i^{(n)}(t) w^{(n)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (213)$$

式 (213) をハミルトニアンに代入する。ここで第1バンドからより高いバンドへの励起は起こらないとして、議論を第1バンドに限る。またバンド指数の表示は省略する。また (i) サイトにある原子は隣接する $(i-1)$ サイト、 $(i+1)$ サイトまでしか波束の広がりをもたないとして、強結合近似することにより Bose-Hubbard モデルが得られる。

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \sum_i (z - \mu) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i \quad (214)$$

和 $\sum_{\langle i,j \rangle}$ は隣接するサイト間のみの和を取ることを意味する。ここで与えられたパラメーター z 、 J 、 U は以下のようなものである。

$$z = \int d^3x w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) (K + V_{\text{opt}}) w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (215)$$

$$J = - \int d^3x w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) (K + V_{\text{opt}}) w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{i+1}) \quad (216)$$

$$U = g \int d^3x w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (217)$$

Bose-Hubbard モデルを用いて BEC 相を扱うためには、次のように秩序変数を導入する [24, 22]。

$$\hat{a}_i \rightarrow \hat{a}_i + n_c^{\frac{1}{2}} \quad (218)$$

$$n_c = \frac{N_c}{I_s} \quad (219)$$

ここで I_s は光学格子のサイト数である。凝縮体は光学格子に一様に分布しておりサイトごとの依存性はないものとした。このように秩序変数を導入をした場合、量子場の展開式は次のようになる。

$$\hat{\Psi}(x) = n_c^{\frac{1}{2}} \sum_i w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) + \sum_i \hat{a}_i(t) w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (220)$$

このとき $\langle 0 | \hat{\Psi}(x) | 0 \rangle$ を計算すると次のようになる。

$$\langle 0 | \hat{\Psi}(x) | 0 \rangle = n_c^{\frac{1}{2}} \sum_i w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (221)$$

ここで $n_c^{\frac{1}{2}} \sum_i w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ は凝縮体を表しているから GP 方程式に従うものでなければならない。従って場を展開する Wannier 関数は何を選んでもよいわけではない。次節ではどのような Wannier 関数を用意することにより自己無撞着な量子場の展開が得られるか、また赤外発散をとまなうギャップレスなモードの扱いについて述べる。

4.2 光学格子中の Bose-Einstein 凝縮における強結合近似

4.2.1 Wannier 関数

GP 方程式

$$(K + V_{\text{opt}} + g|v(\mathbf{x})|^2 - \mu - \varepsilon\bar{\varepsilon}) v(\mathbf{x}) = 0 \quad (222)$$

ここで凝縮相の密度 $|v(\mathbf{x})|^2$ が格子間隔分の並進にたいして不変ならば GP 解は

$$v(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} v_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad v_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{G}) = v_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (223)$$

という Bloch 条件を満たすものになる。ここでは超流動速度ゼロ（凝縮体の位相部分 $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, $S_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = 0$) の静的な場合を考え、GP 方程式の解は実数とする。次に量子場 $\Psi(\mathbf{x})$ を展開するために用いる次のような固有値方程式を考える。

$$(K + V_{\text{opt}} + g|v(\mathbf{x})|^2 - \mu - \varepsilon\bar{\varepsilon}) f_q^{(n)}(\mathbf{x}) = \epsilon_q^{(n)} f_q^{(n)}(\mathbf{x}) \quad (224)$$

この方程式は格子間隔分の並進 ($\mathbf{G} = (l_x d, l_y d, l_z d)$, $l_i = \text{整数}$) に関して不変となるため、解は以下のような Bloch 条件を満たす。

$$f_q^{(n)}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \bar{f}_q^{(n)}(\mathbf{x}) \quad \bar{f}_q^{(n)}(\mathbf{x} + \mathbf{G}) = \bar{f}_q^{(n)}(\mathbf{x}) \quad (225)$$

ここで方程式の対称性から、次のような条件を $f_q^{(n)}(\mathbf{x})$ は満たす

$$\epsilon_q^{(n)} = \epsilon_{-q}^{(n)} \quad (226)$$

$$\bar{f}_q^{(n)*}(\mathbf{x}) = \bar{f}_{-q}^{(n)}(\mathbf{x}) \quad (227)$$

$$f_q^{(n)*}(\mathbf{x}) = f_{-q}^{(n)}(\mathbf{x}) \quad (228)$$

ここで $\epsilon_q^{(n)} = 0$ となる解が存在し、その解を

$$f_0^{(1)}(\mathbf{x}) = N_c^{-1/2} v_0(\mathbf{x}) \quad (229)$$

としておく。この方程式の解は以下のような直交性、完全性を満たす。

$$\int d\mathbf{x} f_{q'}^{(n')*}(\mathbf{x}) f_q^{(n)}(\mathbf{x}) = \delta_{n'n} \delta_{q'q} \quad (230)$$

$$\sum_n \sum_q f_q^{(n)*}(\mathbf{x}') f_q^{(n)}(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (231)$$

量子場 $\Psi(\mathbf{x})$ を $f_q^{(n)}(\mathbf{x})$ を用いて展開すると

$$\hat{\Psi}(\mathbf{x}) = \sum_{n,q} \hat{c}_q^{(n)}(t) f_q^{(n)}(\mathbf{x}) \quad (232)$$

となる。ここで最低エネルギー状態 $f_0^{(1)}(\mathbf{x})$ のモードに関してのコヒーレント状態を考える。

$$\hat{c}_0^{(1)} \rightarrow \hat{c}_0^{(1)} + N_c^{1/2} \quad (233)$$

量子場 $\Psi(\mathbf{x})$ は

$$\hat{\Psi}(\mathbf{x}) = v(\mathbf{x}) + \hat{\phi}(\mathbf{x}) \quad (234)$$

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}) = \sum_{n,q} \hat{c}_q^{(n)}(t) f_q^{(n)}(\mathbf{x}) \quad (235)$$

となり、 $\langle 0 | \hat{\Psi}(\mathbf{x}) | 0 \rangle = v(\mathbf{x})$ となるため量子場の展開に $\{f_q^{(n)}(\mathbf{x})\}$ を用いることは自己無撞着な議論となる。方程式 (224) において光学格子のポテンシャルの振幅 V_{opt} が大きく、波束が光学格子の

各サイトに局在している状況を考える。そのため Bloch 条件を満たす解 $f_q^{(n)}(\mathbf{x})$ を用いた Wannier 関数を考える。

$$w^{(n)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) = I_s^{-1/2} \sum_q e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i} f_q^{(n)}(\mathbf{x}) \quad (236)$$

ここで I_s は光学格子のサイト数である。Wannier 関数の逆変換は以下ようになる。

$$f_q^{(n)}(\mathbf{x}) = I_s^{-1/2} \sum_i e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i} w_n(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (237)$$

Wannier 関数は Bloch 条件を見たす関数 $\{f_q^{(n)}(\mathbf{x})\}$ の完全性、直交性より以下のような直交性、完全性を満たす。

$$\int d^3x w^{(n)*}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) w^{(n)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) = \delta_{n'n} \delta_{ij} \quad (238)$$

$$\sum_{n,i} w^{(n)*}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_i) w^{(n)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (239)$$

ここで定義された Wannier 関数を用いて量子場 $\hat{\phi}(\mathbf{x})$ は次のように展開されることになる。

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}) = \sum_{n,i} \hat{a}_i^{(n)}(t) w_i^{(n)}(\mathbf{x}) \quad (240)$$

$\hat{a}_i^{(n)}$ は量子場 $\hat{\phi}(\mathbf{x})$ を Bloch 条件を満たす関数 $\{f_q^{(n)}(\mathbf{x})\}$ で展開した場合の $\hat{c}_q^{(n)}$ と以下のようなフーリエ変換の関係でつながっている。

$$\hat{a}_i^{(n)}(t) = I_s^{-1/2} \sum_q \hat{c}_q^{(n)}(t) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i} \quad (241)$$

また (236) において $\mathbf{q} = -\mathbf{q}'$ と置換を行うと

$$\begin{aligned} w^{(n)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) &= I_s^{-1/2} \sum_{\mathbf{q}'} e^{i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{x}_i} f_{-\mathbf{q}'}^{(n)}(\mathbf{x}) \\ &= \left(I_s^{-1/2} \sum_{\mathbf{q}'} e^{i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{x}_i} f_{\mathbf{q}'}^{(n)}(\mathbf{x}) \right)^* \\ &= w^{(n)*}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \end{aligned} \quad (242)$$

よって $w^{(n)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ は実数である。ここで式 (228) を用いた。

4.2.2 Gross-Pitaevskii 方程式への強結合近似

ここでは GP 方程式に対して強結合近似をする。ここで GP 解は次のように書ける。

$$v(\mathbf{x}) = n_c^{1/2} \sum_i w^{(1)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (243)$$

$$n_c = \frac{N_c}{I_s} \quad (244)$$

以下では簡単のため $w^{(n)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) = w_i^{(n)}(\mathbf{x})$ と書くことにする。式 (243) を GP 方程式に代入すると以下のようなる。

$$\left(K + V_{\text{opt}} + g n_c \sum_{i_3, i_4} w_{i_3}^{(1)}(\mathbf{x}) w_{i_4}^{(1)}(\mathbf{x}) - \mu - \varepsilon \bar{\varepsilon} \right) n_c^{-1/2} \sum_{i_2} w_{i_2}^{(1)}(\mathbf{x}) = 0 \quad (245)$$

ここで左から $w_{i_1}^{(0)}(\mathbf{x})$ を掛けて積分すると GP 方程式は以下のように書ける。

$$0 = - \sum_{i_2} (J_{i_1 i_2}^{11}) + \sum_{i_2 i_3 i_4} (n_c U_{i_1 i_2 i_3 i_4}^{1111}) - \mu - \varepsilon \bar{\varepsilon} \quad (246)$$

$$J_{i_1 i_2}^{11} = - \int d^3 x w_{i_1}^{(1)}(\mathbf{x}) (K + V_{\text{opt}}) w_{i_2}^{(1)}(\mathbf{x}) \quad (247)$$

$$U_{i_1 i_2 i_3 i_4}^{1111} = g \int d^3 x w_{i_1}^{(1)}(\mathbf{x}) w_{i_2}^{(1)}(\mathbf{x}) w_{i_3}^{(1)}(\mathbf{x}) w_{i_4}^{(1)}(\mathbf{x}) \quad (248)$$

ここで $J_{i_1 i_2}^{11}$ は波束 $w_{i_1}^{(0)}(\mathbf{x})$ の i_1 から i_2 への広がり度合いを表し、 $U_{i_1 i_2 i_3 i_4}^{1111}$ はサイト間の相互作用の強さを表す。波束が各サイトに局在しており $U_{i_1 i_2 i_3 i_4}^{1111}$ は同一サイト $i_1 = i_2 = i_3 = i_4$ にある場合の効果が大きいのと考える。また波束 $w_{i_1}^{(0)}(\mathbf{x})$ は i_1 サイトの最近接までの広がりを考慮に入れ、強結合近似を行う。

$$- \sum_{\langle i, j \rangle} (J_{ij}^{11} + J_{ji}^{11}) + n_c U_{iii}^{1111} - \mu - \varepsilon \bar{\varepsilon} = 0 \quad (249)$$

ここで $\sum_{\langle i, j \rangle}$ は i サイトに近接するサイトのみの和を取ることを意味している。

$$z^{11} = \int d^3 x w_i^{(1)}(\mathbf{x}) (K + V_{\text{opt}}) w_i^{(1)}(\mathbf{x}) \quad (250)$$

$$J^{11} = - \int d^3 x w_i^{(1)}(\mathbf{x}) (K + V_{\text{opt}}) w_{i+1}^{(1)}(\mathbf{x}) \quad (251)$$

$$U^{11} = g \int d^3 x w_i^{(1)}(\mathbf{x}) w_i^{(1)}(\mathbf{x}) w_i^{(1)}(\mathbf{x}) w_i^{(1)}(\mathbf{x}) \quad (252)$$

と定義する。化学ポテンシャル μ は

$$\mu = -2(\text{dim}) \times J^{11} + z^{11} + n_c U^{11} - \varepsilon \bar{\varepsilon} \quad (\text{dim} = 1, 2, 3) \quad (253)$$

となる。

4.2.3 ハミルトニアンに対角化

この節では前節で得られた量子場の展開と化学ポテンシャルを用いて非摂動ハミルトニアンの対角化を行う。量子場 $\hat{\phi}(\mathbf{x})$ と GP 方程式の解

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}) = \sum_{n, i} \hat{a}_i^{(n)}(t) w_i^{(n)}(\mathbf{x}) \quad (254)$$

$$v(\mathbf{x}) = n_c^{-1/2} \sum_i w_i^{(1)}(\mathbf{x}) \quad (255)$$

を非摂動ハミルトニアンに代入する。

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = & \sum_{n,n'} \sum_{i_1,i_2} \left(-J_{i_1 i_2}^{nn'} + \sum_{i_3,i_4} n_c U_{i_1 i_2 i_3 i_4}^{nn' 11} - \mu \delta_{i_1 i_2} \delta_{nn'} \right) \hat{a}_{i_1}^{(n)\dagger} \hat{a}_{i_2}^{(n')} \\ & + \sum_{n,n'} \sum_{i_1,i_2,i_3,i_4} \frac{n_c}{2} U_{i_1 i_2 i_3 i_4}^{nn' 11} \left(2\hat{a}_{i_1}^{(n)\dagger} \hat{a}_{i_2}^{(n')} + \hat{a}_{i_1}^{(n)} \hat{a}_{i_2}^{(n')} + \hat{a}_{i_1}^{(n)\dagger} \hat{a}_{i_2}^{(n')\dagger} \right) \end{aligned} \quad (256)$$

ここで $J_{i_1 i_2}^{nn'}$, $U_{i_1 i_2 i_3 i_4}^{nn' 11}$ は

$$J_{i_1 i_2}^{nn'} = - \int d^3x w_{i_1}^{(n)}(\mathbf{x}) (K + V_{\text{opt}}) w_{i_2}^{(n')}(\mathbf{x}) \quad (257)$$

$$U_{i_1 i_2 i_3 i_4}^{nn' 11} = g \int d^3x w_{i_1}^{(n)}(\mathbf{x}) w_{i_2}^{(n')}(\mathbf{x}) w_{i_3}^{(1)}(\mathbf{x}) w_{i_4}^{(1)}(\mathbf{x}) \quad (258)$$

ここで第1バンドからより高いバンドへの励起はないものとし、第1バンドの部分空間に議論を限る。第1バンド内での完全性として次の完全系を採用する。

$$\sum_i w_i^{(1)}(\mathbf{x}') w_i^{(1)}(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (259)$$

量子場は次のように第1バンド内で展開されるものとする。

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}) = \sum_i \hat{a}_i^{(1)}(t) w_i^{(1)}(\mathbf{x}) \quad (260)$$

以下バンド指数は陽には書かず

$$f_q^{(1)}(\mathbf{x}) = f_q(\mathbf{x}) \quad \hat{c}_q^{(1)} = \hat{c}_q \quad (261)$$

$$w_i^{(1)}(\mathbf{x}) = w_i(\mathbf{x}) \quad \hat{a}_i^{(1)} = \hat{a}_i \quad (262)$$

$$J_{i_1 i_2} = J_{i_1 i_2}^{11} = - \int d^3x w_{i_1}^{(1)}(\mathbf{x}) (K + V_{\text{opt}}) w_{i_2}^{(1)}(\mathbf{x}) \quad (263)$$

$$U_{i_1 i_2 i_3 i_4} = U_{i_1 i_2 i_3 i_4}^{1111} = g \int d^3x w_{i_1}^{(1)}(\mathbf{x}) w_{i_2}^{(1)}(\mathbf{x}) w_{i_3}^{(1)}(\mathbf{x}) w_{i_4}^{(1)}(\mathbf{x}) \quad (264)$$

とする。非摂動ハミルトニアンは次のようになる。

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = & \sum_{i_1,i_2} \left(-J_{i_1 i_2} + \sum_{i_3,i_4} n_c U_{i_1 i_2 i_3 i_4} - \mu \delta_{i_1 i_2} \right) \hat{a}_{i_1}^\dagger \hat{a}_{i_2} \\ & + \sum_{i_1,i_2,i_3,i_4} \frac{n_c}{2} U_{i_1 i_2 i_3 i_4} \left(2\hat{a}_{i_1}^\dagger \hat{a}_{i_2} + \hat{a}_{i_1} \hat{a}_{i_2} + \hat{a}_{i_1}^\dagger \hat{a}_{i_2}^\dagger \right) \end{aligned} \quad (265)$$

強結合近似をすることにより

$$\hat{H}_0 = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \sum_i \left\{ (z - \mu + n_c U) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{U n_c}{2} \left(2\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \right) \right\} \quad (266)$$

となる。 $\sum_{\langle i,j \rangle}$ は近接するサイト間の和のみを取ることを意味する。ここで

$$z = \int d^3x w_i(\mathbf{x}) (K + V_{\text{opt}}) w_i(\mathbf{x}) \quad (267)$$

$$J = - \int d^3x w_i(\mathbf{x}) (K + V_{\text{opt}}) w_{i+1}(\mathbf{x}) \quad (268)$$

$$U = g \int d^3x w_i(\mathbf{x}) w_i(\mathbf{x}) w_i(\mathbf{x}) w_i(\mathbf{x}) \quad (269)$$

である。次の関係式を代入する

$$\hat{a}_i = I_s^{-1/2} \sum_q \hat{c}_q e^{iq \cdot \mathbf{x}_i} \quad (270)$$

$$\hat{a}_i^\dagger = I_s^{-1/2} \sum_q \hat{c}_q^\dagger e^{-iq \cdot \mathbf{x}_i} \quad (271)$$

$$\hat{H}_0 = \sum_q \left(-2J \sum_{i=x,y,z} \cos(q_i d) + z - \mu + n_c U \right) \hat{c}_q^\dagger \hat{c}_q + \sum_q \frac{U n_c}{2} \left(2\hat{c}_q^\dagger \hat{c}_q + \hat{c}_{-q} \hat{c}_q + \hat{c}_{-q}^\dagger \hat{c}_q^\dagger \right) \quad (272)$$

前節で求めた化学ポテンシャル $\mu = -6J + z + n_c U - \varepsilon \bar{\varepsilon}$ を代入する。次のようなハミルトニアンを得る。

$$\hat{H}_0 = \sum_q \lambda_q \hat{c}_q^\dagger \hat{c}_q + \sum_q \frac{U n_c}{2} \left(2\hat{c}_q^\dagger \hat{c}_q + \hat{c}_{-q} \hat{c}_q + \hat{c}_{-q}^\dagger \hat{c}_q^\dagger \right) \quad (273)$$

$$\lambda_q = 2J(3 - \sum_{i=x,y,z} \cos(q_i d)) + \varepsilon \bar{\varepsilon} \quad (274)$$

ここでハミルトニアンは Bogoliubov 変換を用いて対角化できる。

$$\hat{b}_q = u_q \hat{c}_q + v_q \hat{c}_{-q}^\dagger \quad (275)$$

$$\hat{b}_q^\dagger = u_q \hat{c}_q^\dagger + v_q \hat{c}_{-q} \quad (276)$$

$$1 = u_q^2 - v_q^2 \quad (277)$$

u_q, v_q は実の偶関数であり、 u_q, v_q を次のように選ぶと

$$u_q^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\lambda_q + U n_c}{\sqrt{(\lambda_q + U n_c)^2 - (U n_c)^2}} \right) \quad (278)$$

$$v_q^2 = \frac{1}{2} \left(-1 + \frac{\lambda_q + U n_c}{\sqrt{(\lambda_q + U n_c)^2 - (U n_c)^2}} \right) \quad (279)$$

非摂動ハミルトニアンは次のように対角化される。

$$\hat{H}_0 = \sum_q \left(E_q \hat{b}_q^\dagger \hat{b}_q + (\lambda_q + U n_c) v_q^2 - U n_c u_q v_q \right) \quad (280)$$

ここでエネルギースペクトル E_q は

$$\begin{aligned}
 E_q &= \sqrt{\lambda_q^2 + 2Un_c\lambda_q} \\
 &= \sqrt{\left(2J\left[3 - \sum_{i=x,y,z} \cos(q_id)\right]\right)^2 + 2(Un_c + \varepsilon\bar{\varepsilon})2J\left(3 - \sum_{i=x,y,z} \cos(q_id)\right) + 2Un_c\varepsilon\bar{\varepsilon} + (\varepsilon\bar{\varepsilon})^2}
 \end{aligned} \tag{281}$$

$\varepsilon \rightarrow 0$ でエネルギースペクトルはギャップレスになる。また $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限で u_0, v_0 は発散を引き起こすことが解る。ここでは ε を有限に保っている限り発散の問題を回避でき、正準交換関係やWard-高橋恒等式の成立の議論が可能になる。ここで $\varepsilon \rightarrow 0$ でのエネルギースペクトルの分散関係を図2に示す。

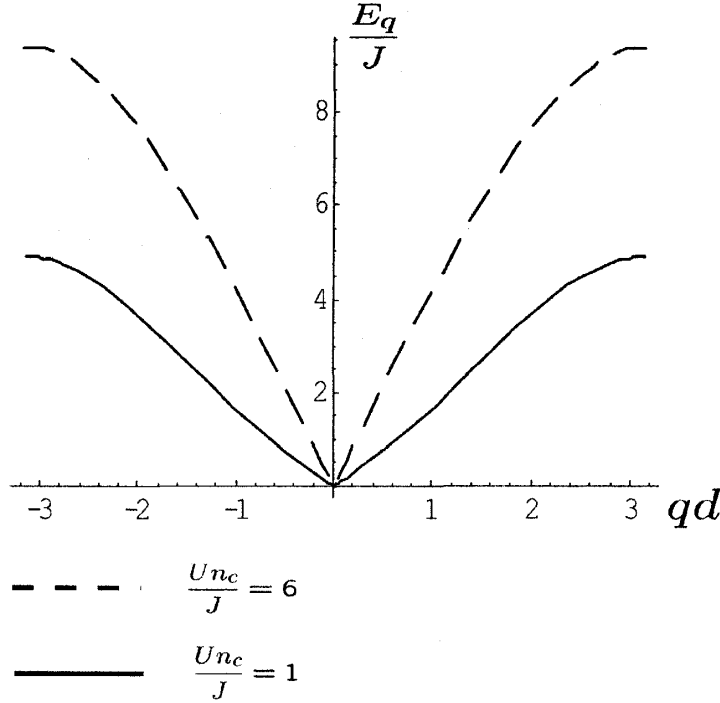


図 2: エネルギースペクトルの分散関係

場は次のように展開されていることになる。

$$\begin{aligned}
 \hat{\phi}(x) &= \sum_i \sum_q I_s^{-1/2} (u_q \hat{b}_q e^{-i\frac{E_q}{\hbar}t} - v_q \hat{b}_{-q}^\dagger e^{i\frac{E_q}{\hbar}t}) e^{iq \cdot x_i} w_i(x) \\
 &= \sum_q \left(u_q f_q(x) e^{-i\frac{E_q}{\hbar}t} \hat{b}_q - v_q f_q^*(x) e^{i\frac{E_q}{\hbar}t} \hat{b}_q^\dagger \right)
 \end{aligned} \tag{282}$$

$$\begin{aligned}
 \hat{\phi}^\dagger(x) &= \sum_i \sum_q I_s^{-1/2} (u_q \hat{b}_q^\dagger e^{i\frac{E_q}{\hbar}t} - v_q \hat{b}_{-q} e^{-i\frac{E_q}{\hbar}t}) e^{-iq \cdot x_i} w(x - x_i) \\
 &= \sum_q \left(u_q f_q^*(x) e^{i\frac{E_q}{\hbar}t} \hat{b}_q^\dagger - v_q f_q(x) e^{-i\frac{E_q}{\hbar}t} \hat{b}_q \right)
 \end{aligned} \tag{283}$$

$\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}', t)$ は第 1 バンド内での同時刻交換関係を満たす。

$$[\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}', t)] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (284)$$

$$[\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{\phi}(\mathbf{x}', t)] = [\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t), \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}', t)] = 0 \quad (285)$$

ここで式 (259) を用いた。

4.2.4 伝播関数

この節では前節でハミルトニアンを対角化することにより得られた表現を用いて、次のような 2×2 行列の非摂動プロパゲーターを定義しておく。

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t') = \begin{pmatrix} G_{11}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t') & G_{12}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t') \\ G_{21}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t') & G_{22}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t') \end{pmatrix} \quad (286)$$

$$\begin{aligned} & G_{11}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t') \\ &= \frac{-i}{\hbar} \sum_q \left[\theta(t - t') u_q^2 f_q(\mathbf{x}) f_q^*(\mathbf{x}') e^{i \frac{E_q}{\hbar} (t' - t)} + \theta(t' - t) v_q^2 f_q(\mathbf{x}') f_q^*(\mathbf{x}) e^{i \frac{E_q}{\hbar} (t - t')} \right] \end{aligned} \quad (287)$$

$$\begin{aligned} & G_{22}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t') \\ &= \frac{-i}{\hbar} \sum_q \left[\theta(t - t') v_q^2 f_q(\mathbf{x}) f_q^*(\mathbf{x}') e^{i \frac{E_q}{\hbar} (t' - t)} + \theta(t' - t) u_q^2 f_q(\mathbf{x}') f_q^*(\mathbf{x}) e^{i \frac{E_q}{\hbar} (t - t')} \right] \end{aligned} \quad (288)$$

$$\begin{aligned} & G_{12}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t') = G_{21}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t') \\ &= \frac{i}{\hbar} \sum_q \left[\theta(t - t') v_q u_q f_q(\mathbf{x}) f_q^*(\mathbf{x}') e^{i \frac{E_q}{\hbar} (t' - t)} + \theta(t' - t) v_q u_q f_q(\mathbf{x}') f_q^*(\mathbf{x}) e^{i \frac{E_q}{\hbar} (t - t')} \right] \end{aligned} \quad (289)$$

プロパゲーターは時間に対して差の関数になっているので、そのフーリエ成分を考える。

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t') &\equiv \int \frac{d\omega}{2\pi} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) e^{-i\omega(t-t')} \\ &= \int \frac{d\omega}{2\pi} \begin{pmatrix} G_{11}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) & G_{12}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) \\ G_{21}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) & G_{22}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) \end{pmatrix} e^{-i\omega(t-t')} \end{aligned} \quad (290)$$

$$G_{11}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = \sum_q \left[\frac{1}{\hbar\omega - E_q + i\delta} u_q^2 f_q(\mathbf{x}) f_q^*(\mathbf{x}') - \frac{1}{\hbar\omega + E_q - i\delta} v_q^2 f_q(\mathbf{x}') f_q^*(\mathbf{x}) \right] \quad (291)$$

$$G_{22}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = \sum_q \left[\frac{1}{\hbar\omega - E_q + i\delta} v_q^2 f_q(\mathbf{x}) f_q^*(\mathbf{x}') - \frac{1}{\hbar\omega + E_q - i\delta} u_q^2 f_q(\mathbf{x}') f_q^*(\mathbf{x}) \right] \quad (292)$$

$$\begin{aligned} G_{12}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) &= G_{21}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) \\ &= \sum_q \left[-\frac{1}{\hbar\omega - E_q + i\delta} v_q u_q f_q(\mathbf{x}) f_q^*(\mathbf{x}') + \frac{1}{\hbar\omega + E_q - i\delta} v_q u_q f_q(\mathbf{x}') f_q^*(\mathbf{x}) \right] \end{aligned} \quad (293)$$

4.3 Ward-高橋恒等式

光学格子における中性原子 BEC の準粒子を求める際に強結合近似を行った。その際求められた準粒子のエネルギースペクトルはギャップレスになることが解った。しかし強結合近似のもとでの選んだ準粒子が系の対称性を保持したものになっているかどうかは自明なことではない。そこでこの節では、このような準粒子の選び方が大域的位相変換不変性を維持したものであるかどうかを調べる。そのため表示によらず、系の対称性から導かれる関係式である Ward-高橋恒等式 (WT 恒等式) [26, 35, 36] の成立を確かめることにする。

4.3.1 Ward-高橋恒等式の導出

次のような微小変換を考える。

$$\Psi(\mathbf{x}) \rightarrow \Psi'(\mathbf{x}) = \Psi(\mathbf{x}) + \delta\Psi(\mathbf{x}) \quad (294)$$

この微小変換に対してラグランジアン密度の変化は

$$\delta\mathcal{L} = \mathcal{L}[\Psi'(\mathbf{x})] - \mathcal{L}[\Psi(\mathbf{x})] \quad (295)$$

ネーター流 N^μ は次の等式を満たす。

$$\delta\mathcal{L} = \partial_\mu N^\mu(\mathbf{x}) \quad (296)$$

ネーター流の第ゼロ成分 $\hat{N}_0(\mathbf{x})$ は次のようなものである。

$$\hat{N}_0(\mathbf{x}) = \hat{\pi}_\Psi \delta\hat{\Psi}(\mathbf{x}) \quad (297)$$

$\hat{N}_0(\mathbf{x})$ を空間に関して積分することにより

$$\hat{N}(t) = \int d^3x \hat{N}_0(\mathbf{x}) \quad (298)$$

を得る。交換関係 $[\hat{\Psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\pi}_\Psi(\mathbf{x}', t)] = i\hbar\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ より $\hat{N}(t)$ は微小変換の生成子になっていることが解る。

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{x}, t), \hat{N}(t)] = i\hbar\delta\hat{\Psi}(\mathbf{x}, t) \quad (299)$$

上で考えた微小変換の生成子を時間微分し、空間積分において無限遠での表面項の寄与はないとすると、以下の式を得る。

$$\frac{d}{dt}\hat{N}(t) = \int d^3x \delta\hat{\mathcal{L}}(x) \quad (300)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \langle \Omega | \hat{N}(t), \hat{\Psi}(x_1) \cdots \hat{\Psi}(x_n) | \Omega \rangle \\ &= \sum_{\alpha=1}^n \delta(t-t_\alpha) \langle \Omega | T[\hat{\Psi}(x_1) \cdots [\hat{N}(t), \hat{\Psi}(x_\alpha)] \cdots \hat{\Psi}(x_n)] | \Omega \rangle \\ & \quad + \langle \Omega | T\left[\left(\frac{d}{dt}\hat{N}(t)\right) \hat{\Psi}(x_1) \cdots \hat{\Psi}(x_n)\right] | \Omega \rangle \\ &= -i\hbar \sum_{\alpha=1}^n \delta(t-t_\alpha) \langle \Omega | T[\hat{\Psi}(x_1) \cdots \delta\hat{\Psi}(x_\alpha) \cdots \hat{\Psi}(x_n)] | \Omega \rangle \\ & \quad + \int d^3x \langle \Omega | T[\delta\hat{\mathcal{L}}(x) \hat{\Psi}(x_1) \cdots \hat{\Psi}(x_n)] | \Omega \rangle \end{aligned} \quad (301)$$

両辺を t で積分することにより

$$\sum_{\alpha=1}^n i\hbar \langle \Omega | T[\hat{\Psi}(x_1) \cdots \delta\hat{\Psi}(x_\alpha) \cdots \hat{\Psi}(x_n)] | \Omega \rangle = \int d^4x \langle \Omega | T[\delta\hat{\mathcal{L}}(x) \hat{\Psi}(x_1) \cdots \hat{\Psi}(x_n)] | \Omega \rangle \quad (302)$$

を得る。これが Ward-高橋恒等式である。

4.3.2 Ward-高橋恒等式の成立

対称性を微小に破る項を以下のように書いておく

$$\Delta S = \int d^4x \varepsilon \Xi(x) \quad (303)$$

$$\varepsilon \Xi(x) = \varepsilon \bar{\varepsilon} \left[v(x) \Psi(x) + v(x) \Psi^\dagger(x) \right] \quad (304)$$

このときラグランジアン密度と微小変換の生成子との交換関係は

$$\delta\hat{\mathcal{L}} = \varepsilon \delta\hat{\Xi}(x) = i[\hat{N}(t), \varepsilon \hat{\Xi}(x)] \quad (305)$$

となる。ここで2点の Ward-高橋恒等式を考える。

$$i\hbar \langle \Omega | \delta\delta\hat{\Xi}(x) | \Omega \rangle = \int d^4x' \langle \Omega | T[\varepsilon \delta\hat{\Xi}(x') \delta\hat{\Xi}(x)] | \Omega \rangle \quad (306)$$

具体的には

$$\begin{aligned} v(x) = \frac{i}{2\hbar} (\varepsilon \bar{\varepsilon}) \int d^4x' v(x') & \left[\langle \Omega | T[\hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}^\dagger(x')] | \Omega \rangle + \langle \Omega | T[\hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x')] | \Omega \rangle \right. \\ & \left. - \langle \Omega | T[\hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x')] | \Omega \rangle - \langle \Omega | T[\hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}^\dagger(x')] | \Omega \rangle \right] \end{aligned} \quad (307)$$

となる。ここで強結合近似、ツリーレベルで求めた準粒子の表現と真空を用いて WT 恒等式の成立を議論していく。ツリーレベルの非摂動プロパゲーターを用いて WT 恒等式は次のように書ける。

$$v(\mathbf{x}) = \frac{-1}{2}(\varepsilon\bar{\varepsilon}) \int d^4x' v(\mathbf{x}') [G_{11}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t-t') + G_{22}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t-t') - G_{12}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t-t') - G_{21}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t-t')] \quad (308)$$

時間に関する積分を実行すると $\omega = 0$ の成分のみが残ることが解るので

$$v(\mathbf{x}) = \frac{-1}{2}(\varepsilon\bar{\varepsilon}) \int d^3x' v(\mathbf{x}') [G_{11}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega=0) + G_{22}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega=0) - G_{12}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega=0) - G_{21}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega=0)] \quad (309)$$

となる。具体的な形を代入すると

$$v(\mathbf{x}) = \sum_q \frac{-1}{2}(\varepsilon\bar{\varepsilon}) \int d^3x' v(\mathbf{x}') \left[- \left(\frac{1}{E_q} u_q^2 f_q(\mathbf{x}) f_q^*(\mathbf{x}') + \frac{1}{E_q} v_q^2 f_q^*(\mathbf{x}) f_q(\mathbf{x}') \right) - \left(\frac{1}{E_q} v_q^2 f_q(\mathbf{x}) f_q^*(\mathbf{x}') + \frac{1}{E_q} u_q^2 f_q^*(\mathbf{x}) f_q(\mathbf{x}') \right) - 2 \left(\frac{1}{E_q} u_q v_q f_q(\mathbf{x}) f_q^*(\mathbf{x}') + \frac{1}{E_q} u_q v_q f_q^*(\mathbf{x}) f_q(\mathbf{x}') \right) \right] \quad (310)$$

ここで直交関係

$$\int d^3x' v(\mathbf{x}') f_q^*(\mathbf{x}') = \int d^3x' v(\mathbf{x}') f_q(\mathbf{x}') = \sqrt{N_c} \delta_{0q} \quad (311)$$

を用いることにより

$$v(\mathbf{x}) = v(\mathbf{x}) \frac{(\varepsilon\bar{\varepsilon})}{E_0} \left[u_0^2 + v_0^2 + 2u_0v_0 \right] \quad (312)$$

ここで

$$E_0 = \sqrt{\varepsilon\bar{\varepsilon}(2Un_c + \varepsilon\bar{\varepsilon})} \quad (313)$$

$$u_0^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon\bar{\varepsilon} + Un_c}{\sqrt{\varepsilon\bar{\varepsilon}(2Un_c + \varepsilon\bar{\varepsilon})}} \right) \quad (314)$$

$$v_0^2 = \frac{1}{2} \left(-1 + \frac{\varepsilon\bar{\varepsilon} + Un_c}{\sqrt{\varepsilon\bar{\varepsilon}(2Un_c + \varepsilon\bar{\varepsilon})}} \right) \quad (315)$$

$$u_0v_0 = \frac{1}{2} \sqrt{-1 + \frac{(\varepsilon\bar{\varepsilon} + Un_c)^2}{\varepsilon\bar{\varepsilon}(2Un_c + \varepsilon\bar{\varepsilon})}} \quad (316)$$

以上の関係式は $\varepsilon \rightarrow 0$ を取る極限で

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{u_0^2(\varepsilon\bar{\varepsilon})}{E_0} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{v_0^2(\varepsilon\bar{\varepsilon})}{E_0} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{u_0 v_0(\varepsilon\bar{\varepsilon})}{E_0} = \frac{1}{4} \quad (317)$$

となる。すなわち $\varepsilon \rightarrow 0$ のラグランジアンの特称性を回復させる極限で

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} v(\mathbf{x}) \frac{(\varepsilon\bar{\varepsilon})}{E_0} \left[u_0^2 + v_0^2 + 2u_0 v_0 \right] = v(\mathbf{x}) \quad (318)$$

となりツリーレベル、強結合近似のもとで WT 恒等式が成立している事がわかる。WT 恒等式が成立する際に重要であったのは $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ のモードであり、このモードが大域的位相変換不変性を保つために必要であることが解る。南部-Goldstone の定理は WT 恒等式から証明される。前節で求めたギャップレスなモードが WT 恒等式成立のための役割を果たしたことから、系の不変性を保つために現れる南部-Goldstone モードであることが確かめられたといえる。

4.4 凝縮体に流れがある場合の強結合近似

この節では凝縮体に流れがある場合のハミルトニアンの特角化を試みる。凝縮体に流れがある場合の BdG 方程式を数値計算したとき、BdG 方程式の固有値に複素固有値が表れることが解っている (dynamical instability)[20, 41]。dynamical instability は凝縮体に不安定性を与えるものとされ、この状況に対応する実験も行われている [44]。BdG 方程式に複素固有値が表れる条件は第 3 章で述べた。この問題を解析的に扱うために強結合近似を用いた方法が用いられる。その方法は次のようなものである。GP 方程式を強結合近似することにより Discrete Nonlinear Schrödinger 方程式 (DNLSE) が得られる [23]。そして DNLSE が従う微小な c -数場の微小な変位が満たす方程式として強結合近似のもとでの BdG 方程式が得られ、強結合近似 BdG 方程式の固有値を解析的に求めるといものである。強結合近似 BdG 方程式の固有値には複素固有値が存在し、しばしば複素固有値は準粒子のエネルギースペクトルが複素数であると解釈される。ただし本来準粒子のエネルギースペクトルはハミルトニアンが対角化されたときに初めてエネルギーであるという解釈が成り立つ。この節では強結合近似を行うことにより、複素固有値が現れる状況であってもハミルトニアンが対角化されるかどうかを確かめる。また BdG 方程式に複素固有値があらわれるときの条件との対応を論じる。

4.4.1 Wannier 関数

凝縮体に定常的な流れがある状況での強結合近似を行う際に使用する Wannier 関数を求めておく。凝縮体に定常的な流れがあり、かつ凝縮体の密度 $n_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = |v_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})|^2$ が格子間隔分の周期性を持つ場合、GP 方程式の解は

$$v(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} v_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad v_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{G}) = v_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (319)$$

となる。ここからは簡単のため 1 次元に話を限る。 $v(x) = e^{ikx}v_k(x)$ を代入し GP 方程式を変形すると以下ようになる。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x} + ik \right)^2 + V_{\text{opt}}(x) - \mu + gn_k(x) - \varepsilon \bar{\varepsilon} \right] v_k(x) = 0 \quad (320)$$

次に以下のような固有値方程式を考える

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x} + ik \right)^2 + V_{\text{opt}}(x) - \mu + gn_k(x) - \varepsilon \bar{\varepsilon} \right] f_{kq}(x) = \epsilon_{kq} f_{kq}(x) \quad (321)$$

この方程式は格子間隔分の並進 $x \rightarrow x + dl$ (l : 整数) に対して不変になる。次のような Bloch 条件を満たす解を持つ。

$$f_{kq}^{(n)}(x) = e^{iqx} \bar{f}_{kq}^{(n)}(x) \quad \bar{f}_{kq}^{(n)}(x + dl) = \bar{f}_{kq}^{(n)}(x) \quad (322)$$

ここで n はバンド指数である。 $\epsilon_{kq}^{(n)} = 0$ の解は

$$f_{k0}^{(1)}(x) = N_c^{-1/2} v_k(x) \quad (323)$$

となる。この方程式の解は以下のような直交性、完全性を満たす。

$$\int dx f_{kq'}^{(n')*}(x) f_{kq}^{(n)}(x) = \delta_{n'n} \delta_{q'q} \quad (324)$$

$$\sum_{n,q} f_{kq}^{(n)*}(x') f_{kq}^{(n)}(x) = \delta(x - x') \quad (325)$$

次に以上の Bloch 条件を満たす解から作られる Wannier 関数を考える。

$$w^{(n)}(x - x_i) = I_s^{-1/2} \sum_q e^{-iqx_i} f_{kq}^{(n)}(x) \quad (326)$$

Wannier 関数の逆変換は次のように与えられる。

$$f_{kq}^{(n)}(x) = I_s^{-1/2} \sum_i e^{iqx_i} w^{(n)}(x - x_i) \quad (327)$$

Wannier 関数は以下のような直交性、完全性を満たす。

$$\int dx w^{(n')*}(x - x_i) w^{(n)}(x - x_j) = \delta_{n'n} \delta_{ij} \quad (328)$$

$$\sum_{n,i} w^{(n)*}(x' - x_i) w^{(n)}(x - x_i) = \delta(x - x') \quad (329)$$

次のような関数を定義する。

$$W^{(n)}(x - x_i) = e^{ik(x-x_i)} w^{(n)}(x - x_i) \quad (330)$$

この関数は式 (328)、(329) を用いると次のような直交性、完全性を満たしていることが解る。

$$\int dx W^{(n')*}(x - x_i) W^{(n)}(x - x_j) = e^{ik(x_i - x_j)} \delta_{n'n} \delta_{ij} = \delta_{n'n} \delta_{ij} \quad (331)$$

$$\sum_{n,i} W^{(n)*}(x' - x_i) W^{(n)}(x - x_i) = e^{ik(x - x')} \delta(x - x') = \delta(x - x') \quad (332)$$

ここで定義した関数は Wannier 関数としての性質を満たしていることが解る。ここからは第 1 バンドに議論を限り、バンド指数は陽に書かないことにする。Bloch 条件から出てくる位相部分 e^{ikx} を除いた GP 方程式の解は $v_k(x) = N_c^{1/2} f_{k0}(x) = n_c^{1/2} \sum_i w(x - x_i)$ である。よって GP 方程式の解は新たに定義した Wannier 関数を用いて次のような形で書ける。

$$\begin{aligned} v(x) &= e^{ikx} \sum_i n_c^{1/2} w(x - x_i) \\ &= \sum_i n_c^{1/2} e^{ikx_i} W(x - x_i) \end{aligned} \quad (333)$$

GP 解は Wannier 関数を用いて展開係数 $n_i = n_c^{1/2} e^{ikx_i}$ で、 $v(x) = \sum_i n_i W(x - x_i)$ と展開されていることになる。この結果は GP 方程式を強結合近似することにより得られる Discrete Nonlinear Schrödinger 方程式の定常解と一致する [23, 42]。

4.4.2 Gross-Pitaevskii 方程式への強結合近似

GP 方程式に対し強結合近似を行い化学ポテンシャルを決める。GP 方程式に式 (333) を代入する。

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\text{opt}}(x) + g n_c \sum_{i_3, i_4} e^{ik(x_{i_4} - x_{i_3})} W_{i_3}^*(x) W_{i_4}(x) - \mu - \varepsilon \bar{\varepsilon} \right) \sum_{i_2} n_c^{1/2} e^{ikx_{i_2}} W_{i_2}(x) = 0 \quad (334)$$

左辺から $W_{i_1}^*(x)$ を掛け積分する。ここで $W_i(x) = W(x - x_i)$ である。

$$0 = \sum_{i_2} \left(-J_{i_1 i_2} + n_c e^{ik(x_{i_4} - x_{i_3})} \sum_{i_3, i_4} U_{i_1 i_2 i_3 i_4} - \mu - \varepsilon \bar{\varepsilon} \right) n_c^{1/2} e^{ikx_{i_2}} \quad (335)$$

$$J_{i_1 i_2} = - \int dx W_{i_1}^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\text{opt}} \right) W_{i_2}(x) \quad (336)$$

$$U_{i_1 i_2 i_3 i_4} = g \int dx W_{i_1}^*(x) W_{i_2}(x) W_{i_3}^*(x) W_{i_4}(x) \quad (337)$$

$J_{i_1 i_2}$ は複素数となっており、 $J_{i_1 i_2} = J_{i_2 i_1}^*$ となる。この結果は凝縮体に流れがあることに起因する。 $J_{i_1 i_2}$ は i_1 サイトから i_2 サイトへの波束の広がり进行评估する量であるが、凝縮体に流れがある場合には、 i_1 サイトから i_2 サイトへの波束の広がりとは i_2 サイトから i_1 サイトへ波束の広がりには違いが出るはずである。そのことを反映して $J_{i_1 i_2}$ は複素数となったと考えられる。以下で強結合近似を行う。

$$\sum_{\langle i_1, i_2 \rangle} -J_{i_1 i_2} n_c^{1/2} e^{ikx_{i_2}} + (n_c U_{i_1 i_1 i_1 i_1} - \mu - \varepsilon \bar{\varepsilon}) n_c^{1/2} e^{ikx_{i_1}} = 0 \quad (338)$$

ここで

$$J = J_{i_1, i_1+1} = - \int dx W_{i_1}^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\text{opt}} \right) W_{i_1+1}(x) \quad (339)$$

$$J^* = J_{i_1+1, i_1} = - \int dx W_{i_1+1}^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\text{opt}} \right) W_{i_1}(x) \quad (340)$$

$$z = J_{i_1, i_1} = \int dx W_{i_1}^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\text{opt}} \right) W_{i_1}(x) \quad (341)$$

$$U = U_{i_1 i_1 i_1 i_1} = g \int dx W_{i_1}^*(x) W_{i_1}(x) W_{i_1}^*(x) W_{i_1}(x) \quad (342)$$

とする。化学ポテンシャルは次のようになる。

$$\begin{aligned} \mu &= -J e^{ikd} - J^* e^{-ikd} + z + n_c U - \varepsilon \bar{\varepsilon} \\ &= 2\text{Re}[J e^{ikd}] + z + n_c U - \varepsilon \bar{\varepsilon} \end{aligned} \quad (343)$$

4.4.3 ハミルトニアン

量子場 $\hat{\phi}(x)$ を $\hat{\phi}(x) = e^{ikx} \hat{\phi}_k(x)$ と改めて書く。量子場 $\hat{\phi}(x)$ は次のように展開される。

$$\hat{\phi}(x) = e^{ikx} \sum_i \hat{a}_i(t) w_i(x) = \sum_i \hat{a}_i(t) e^{ikx_i} W_i(x) \quad (344)$$

量子場 (344) と GP 方程式の解 (333) を非摂動ハミルトニアンに代入すると以下のようにになる。

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \int dx \sum_{i_1, i_2} e^{ik(x_{i_2} - x_{i_1})} W_{i_1}^*(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\text{opt}} - \mu \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i_3, i_4} g n_c e^{ik(x_{i_4} - x_{i_3})} W_{i_3}^*(x) W_{i_4}(x) \right\} W_{i_2}(x) \hat{a}_{i_1}^\dagger \hat{a}_{i_2} \\ &\quad + \sum_{i_1, i_2, i_3, i_4} \frac{g n_c}{2} e^{ik(x_{i_2} + x_{i_3} - x_{i_1} - x_{i_4})} W_{i_1}^*(x) W_{i_2}(x) W_{i_3}(x) W_{i_4}^*(x) \left(\hat{a}_{i_1}^\dagger \hat{a}_{i_2} + \hat{a}_{i_1} \hat{a}_{i_2} + \hat{a}_{i_1}^\dagger \hat{a}_{i_2}^\dagger \right) \end{aligned} \quad (345)$$

このハミルトニアンに対して強結合近似を行うと

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_i \left\{ -J e^{ikd} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i+1} - J^* e^{-ikd} \hat{a}_{i+1}^\dagger \hat{a}_i \right. \\ &\quad \left. + (z - \mu + n_c U) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{U n_c}{2} (2 \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger) \right\} \end{aligned} \quad (346)$$

となる。強結合近似を行ったハミルトニアンに対して $\hat{a}_i = I_s^{-1/2} \sum_q \hat{c}_{kq} e^{iqx_i}$ と $\hat{a}_i^\dagger = I_s^{-1/2} \sum_q \hat{c}_{kq}^\dagger e^{-iqx_i}$ 、また化学ポテンシャル $\mu = -2\text{Re}[J e^{ikd}] + z + n_c U - \varepsilon \bar{\varepsilon}$ を代入すると以下の形を得る。

$$\hat{H}_0 = \sum_q \lambda_{kq} \hat{c}_{kq}^\dagger \hat{c}_{kq} + \sum_q \frac{U n_c}{2} \left(2 \hat{c}_{kq}^\dagger \hat{c}_{kq} + \hat{c}_{k-q} \hat{c}_{kq} + \hat{c}_{k-q}^\dagger \hat{c}_{kq}^\dagger \right) \quad (347)$$

$$\lambda_{kq} = 2\text{Re}[J e^{ikd} (1 - e^{iqd})] + \varepsilon \bar{\varepsilon} \quad (348)$$

ここで $J = |J|e^{i\Theta}$ とすると λ_{kq} は

$$\lambda_{kq} = 4|J| \sin\left(\Theta + kd + \frac{qd}{2}\right) \sin\left(\frac{qd}{2}\right) + \varepsilon\bar{\varepsilon} \quad (349)$$

このハミルトニアンは前節で求めた、凝縮体に流れがない場合のハミルトニアンと似た形をしているが λ_{kq} の形が異なる。このハミルトニアンを対角化することにより、強結合近似化での凝縮体に流れがある場合の準粒子のエネルギースペクトルを求めることができる。次節ではこのハミルトニアンを解析を詳しく行う。

4.5 ハミルトニアン解析

前節で得られたハミルトニアンをこの節で行う。ハミルトニアンを次のような行列表示で書いておく。

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \sum_q \hat{c}_{kq}^\dagger \rho_3 T^{(kq)} \hat{c}_{kq} - \sum_q \frac{1}{2} (\lambda_{kq} + U n_c) \quad (350)$$

$$\hat{c}_{kq} = \begin{pmatrix} \hat{c}_{kq} \\ \hat{c}_{k-q}^\dagger \end{pmatrix} \quad (351)$$

$$T^{(kq)} = \begin{pmatrix} (\lambda_{kq} + U n_c) & U n_c \\ -U n_c & -(\lambda_{k-q} + U n_c) \end{pmatrix} \quad (352)$$

4.5.1 時間発展方程式

$\hat{c}_{kq}, \hat{c}_{kq}^\dagger$ に関する時間発展を考える。

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \hat{c}_{kq} \\ \hat{c}_{k-q}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [\hat{c}_{kq}, \hat{H}_0] \\ [\hat{c}_{k-q}^\dagger, \hat{H}_0] \end{pmatrix} \quad (353)$$

時間発展の方程式は次のような連立微分方程式になる。

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{c}_{kq} = T^{(kq)} \hat{c}_{kq} \quad (354)$$

いま $T^{(kq)}$ を対角化するような行列

$$O^{(kq)-1} T^{(kq)} O^{(kq)} = E^{(kq)} = \begin{pmatrix} \hbar\omega_{kq}^{(+)} & 0 \\ 0 & \hbar\omega_{kq}^{(-)} \end{pmatrix} \quad (355)$$

を得たとする。このとき

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{b}_{kq} = E^{(kq)} \hat{b}_{kq} \quad (356)$$

$$\begin{aligned} \hat{b}_{kq} &= O^{(kq)-1} \hat{c}_{kq} \\ &= \begin{pmatrix} \hat{b}_{kq} \\ \hat{b}_{k-q}^\dagger \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (357)$$

となり、次の2つの独立な方程式を得る。

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{b}_{kq} = \hbar\omega_{kq}^{(+)} \hat{b}_{kq}, \quad i\hbar \frac{d}{dt} \hat{b}_{k-q}^{\dagger} = \hbar\omega_{kq}^{(-)} \hat{b}_{k-q}^{\dagger} \quad (358)$$

この方程式を解けば $\hat{b}_{kq}$ 、 $\hat{b}_{k-q}^{\dagger}$ に関する解

$$\hat{b}_{kq}(t) = \hat{b}_{kq} e^{-i\omega_{kq}^{(+)} t}, \quad \hat{b}_{k-q}^{\dagger}(t) = \hat{b}_{k-q}^{\dagger} e^{-i\omega_{kq}^{(-)} t} \quad (359)$$

を得ることができる。いわゆるノーマルモードの方法である。この結果を見ると $\hat{b}_{kq}$ 、 $\hat{b}_{k-q}^{\dagger}$ の肩に乗っている振動数 $\omega_{kq}^{(+)}$ 、 $\omega_{kq}^{(-)}$ を演算子 $\hat{b}_{kq}$ 、 $\hat{b}_{k-q}^{\dagger}$ に付随する準粒子のエネルギーと解釈したくなる。しかしこのようにして得られた $\hat{b}_{kq}$ 、 $\hat{b}_{k-q}^{\dagger}$ が全ての場合で正準交換関係を満たし、ハミルトニアンが対角化できるか確かではない場合がある。その本質は $T^{(kq)}$ が非エルミート行列であり複素固有値を含むことに起因する。次に行列 $T^{(kq)}$ の性質を詳細に検討していく。

4.5.2 固有値方程式の解析

次の固有値方程式を考えていく。

$$T^{(kq)} x_{kq} = \hbar\omega_{kq} x_{kq} \quad (360)$$

2行2列の固有値問題なので $T^{(kq)}$ に対して二つの独立な固有値と固有ベクトルが存在する。

$$\text{固有値 } \hbar\omega_{kq}^{(+)}, \quad \text{固有ベクトル } x_{kq}^{(+)} = \begin{pmatrix} u_{kq}^{(+)} \\ v_{kq}^{(+)} \end{pmatrix} \quad (361)$$

$$\text{固有値 } \hbar\omega_{kq}^{(-)}, \quad \text{固有ベクトル } x_{kq}^{(-)} = \begin{pmatrix} u_{kq}^{(-)} \\ v_{kq}^{(-)} \end{pmatrix} \quad (362)$$

$\hbar\omega_{kq}$ は以下ようになる。

$$\hbar\omega_{kq}^{(\pm)} = \hbar\omega_{kq}^R \pm \hbar\omega_{kq}^L \quad (363)$$

$$\hbar\omega_{kq}^R = \frac{1}{2}(\lambda_{kq} - \lambda_{k-q}) \quad (364)$$

$$\hbar\omega_{kq}^L = \frac{1}{2}\sqrt{(\lambda_{kq} + \lambda_{k-q})^2 + 4U n_c(\lambda_{kq} + \lambda_{k-q})} \quad (365)$$

ここで性質として以下のことが言える。

$$\hbar\omega_{kq}^L = \hbar\omega_{k-q}^L \quad (366)$$

$$\hbar\omega_{k-q}^R = -\hbar\omega_{kq}^R \quad (367)$$

$$\hbar\omega_{k-q}^{(-)} = -\hbar\omega_{kq}^{(+)} \quad (368)$$

$\hbar\omega_{kq}^{(\pm)}$ を固有値方程式 (360) に代入すると以下の関係式を得る。

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\lambda_{kq} + \lambda_{k-q}) + U n_c & U n_c \\ -U n_c & -\frac{1}{2}(\lambda_{kq} + \lambda_{k-q}) - U n_c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{kq}^{(\pm)} \\ v_{kq}^{(\pm)} \end{pmatrix} = \pm \hbar\omega_{kq}^L \begin{pmatrix} u_{kq}^{(\pm)} \\ v_{kq}^{(\pm)} \end{pmatrix} \quad (369)$$

この方程式は $q \rightarrow -q$ に対して不変な形をしているので、次の性質を得る。

$$u_{kq}^{(\pm)} = u_{k-q}^{(\pm)}, \quad v_{kq}^{(\pm)} = v_{k-q}^{(\pm)} \quad (370)$$

以上より $T^{(kq)} \mathbf{x}_{kq} = \hbar\omega_{kq} \mathbf{x}_{kq}$ と $T^{(k-q)} \mathbf{x}_{k-q} = \hbar\omega_{k-q} \mathbf{x}_{k-q}$ は同じ固有ベクトルを持つ。すなわち

$$\mathbf{x}_{kq}^{(\pm)} = \mathbf{x}_{k-q}^{(\pm)} \quad (371)$$

である。ここで $T^{(kq)}$ と $T^{(k-q)}$ の間には次のような関係がある。

$$T^{(k-q)} = -\rho_1 T^{(kq)} \rho_1 \quad (372)$$

この関係式と式 (368) を用いることにより

$$\begin{aligned} T^{(k-q)} \rho_1 \mathbf{x}_{kq}^{(+)} &= -\hbar\omega_{kq}^{(+)} \rho_1 \mathbf{x}_{kq}^{(+)} \\ &= \hbar\omega_{k-q}^{(-)} \rho_1 \mathbf{x}_{kq}^{(+)} \end{aligned} \quad (373)$$

よって

$$\mathbf{x}_{k-q}^{(-)} = \rho_1 \mathbf{x}_{kq}^{(+)} \quad (374)$$

を得る。ここで $\mathbf{x}_{k-q}^{(-)} = \mathbf{x}_{kq}^{(-)}$ より $\mathbf{x}_{kq}^{(-)} = \rho_1 \mathbf{x}_{kq}^{(+)}$ なので $T^{(kq)} \mathbf{x}_{kq} = \hbar\omega_{kq} \mathbf{x}_{kq}$ の固有値問題の独立な解は

$$\hbar\omega_{kq}^{(+)} \quad , \quad \mathbf{x}_{kq}^{(+)} = \begin{pmatrix} u_{kq}^{(+)} \\ v_{kq}^{(+)} \end{pmatrix} \quad (375)$$

$$\hbar\omega_{kq}^{(-)} = -\hbar\omega_{k-q}^{(+)} \quad , \quad \mathbf{x}_{kq}^{(-)} = \rho_1 \mathbf{x}_{kq}^{(+)} = \begin{pmatrix} v_{kq}^{(+)} \\ u_{kq}^{(+)} \end{pmatrix} \quad (376)$$

であることが解る。以上の考察から2つの独立な固有値と固有ベクトルの関係が解った。次に固有ベクトル間の直交関係を調べていく。固有方程式 $T^{(kq)} \mathbf{x}_{kq}^{(s)} = \hbar\omega_{kq}^{(s)} \mathbf{x}_{kq}^{(s)}$ に左辺から $\mathbf{x}_{kq}^{(s')T} \rho_3$ を掛けることにより以下の関係式を得る。ここで s, s' は $+$ か $-$ をとるものとする。

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{kq}^{(s')T} \rho_3 T^{(kq)} \mathbf{x}_{kq}^{(s)} &= \hbar\omega_{kq}^{(s)} (\mathbf{x}_{kq}^{(s')T} \rho_3 \mathbf{x}_{kq}^{(s)}) \\ &= \hbar\omega_{kq}^{(s')} (\mathbf{x}_{kq}^{(s')T} \rho_3 \mathbf{x}_{kq}^{(s)}) \end{aligned} \quad (377)$$

より

$$(\hbar\omega_{kq}^{(s')} - \hbar\omega_{kq}^{(s)}) (\mathbf{x}_{kq}^{(s')T} \rho_3 \mathbf{x}_{kq}^{(s)}) = 0 \quad (378)$$

$s = s' = +$ の場合

$$(\mathbf{x}_{kq}^{(+T)} \rho_3 \mathbf{x}_{kq}^{(+)}) = 1 \quad (379)$$

と規格化しておく。 $s = s' = -$ の場合

$$(\mathbf{x}_{kq}^{(-T)} \rho_3 \mathbf{x}_{kq}^{(-)}) = -1 \quad (380)$$

と規格化される。実際 $\mathbf{x}_{kq}^{(-)} = \rho_1 \mathbf{x}_{kq}^{(+)}$ を代入してみると $(\mathbf{x}_{kq}^{(+T)} \rho_3 \mathbf{x}_{kq}^{(+)}) = 1$ と同じであることが解る。次に $s \neq s'$ の場合を考える。

$$(\hbar\omega_{kq}^{(s')} - \hbar\omega_{kq}^{(s)})(\mathbf{x}_{kq}^{(s'T)} \rho_3 \mathbf{x}_{kq}^{(s)}) = 0 \quad (381)$$

$\hbar\omega_{kq}^{(s')} \neq \hbar\omega_{kq}^{(s)}$ より $(\mathbf{x}_{kq}^{(s'T)} \rho_3 \mathbf{x}_{kq}^{(s')}) = 0$ である。よって次の直交関係を得る

$$(\mathbf{x}_{kq}^{(+T)} \rho_3 \mathbf{x}_{kq}^{(-)}) = 0 \quad (382)$$

ここで式 (379)、(380)、(382) は BdG 方程式の直交関係と対応している。

4.5.3 $\hbar\omega_{kq}^{(+)}$ の具体的な形

ここで $\hbar\omega_{kq}^{(+)}$ の具体的な形を導出しておく。いま $\lambda_{kq} = 4|J| \sin\left(\Theta + kd + \frac{qd}{2}\right) \sin\left(\frac{qd}{2}\right) + \varepsilon\bar{\varepsilon}$ を $\hbar\omega_{kq}^{(+)}$ に代入する。ここで ε の依存性を明らかにするために $\hbar\omega_{kq}^{(+)\varepsilon}$ と表記しておく。

$$\hbar\omega_{kq}^{(+)\varepsilon} = \hbar\omega_{kq}^{R\varepsilon} + \hbar\omega_{kq}^{L\varepsilon} \quad (383)$$

$$\hbar\omega_{kq}^{R\varepsilon} = 2|J| \sin(\Theta + kd) \sin(qd) \quad (384)$$

$$\hbar\omega_{kq}^{L\varepsilon} = \sqrt{|J| \left(2 \cos(\Theta + kd) \sin^2\left(\frac{qd}{2}\right) + 2\varepsilon\bar{\varepsilon} \right) \left(2|J| \cos(\Theta + kd) \sin^2\left(\frac{qd}{2}\right) + 4Un_c + 2\varepsilon\bar{\varepsilon} \right)} \quad (385)$$

ここで $q = 0$ 、 $\varepsilon \rightarrow 0$ としたとき固有値はギャップレスである。 $\varepsilon \rightarrow 0$ の場合の固有値を表記しておく。

$$\hbar\omega_{kq}^{(+)} = \hbar\omega_{kq}^R + \hbar\omega_{kq}^L \quad (386)$$

$$\hbar\omega_{kq}^R = 2|J| \sin(\Theta + kd) \sin(qd) \quad (387)$$

$$\hbar\omega_{kq}^L = 2 \sin\left(\frac{qd}{2}\right) \sqrt{2|J| \cos(\Theta + kd) \left(2|J| \cos(\Theta + kd) \sin^2\left(\frac{qd}{2}\right) + Un_c \right)} \quad (388)$$

$\hbar\omega_{kq}^{(+)}$ が実の固有値である場合、その固有値が正である場合 $\hbar\omega_{kq}^{(+)} > 0$ と負になる場合 $\hbar\omega_{kq}^{(+)} < 0$ がある。固有値が負になるような状況は Landau instability に相当する。 $\hbar\omega_{kq}^{(+)} < 0$ となる条件は

$$\cos\left(\frac{qd}{2}\right) > \cos(\Theta + kd) \left(\cos(\Theta + kd) + \frac{Un_c}{2|J|} \right) \quad (389)$$

実固有値の場合の u_{kq} 、 v_{kq} は

$$u_{kq}^{(+)} = \frac{Un_c}{\sqrt{(Un_c)^2 - \left(\frac{\lambda_{kq} + \lambda_{k-q}}{2} - \hbar\omega_{kq}^L + Un_c\right)^2}} \quad (390)$$

$$v_{kq}^{(+)} = \frac{\frac{\lambda_{kq} + \lambda_{k-q}}{2} - \hbar\omega_{kq}^L - Un_c}{\sqrt{(Un_c)^2 - \left(\frac{\lambda_{kq} + \lambda_{k-q}}{2} - \hbar\omega_{kq}^L + Un_c\right)^2}} \quad (391)$$

$\varepsilon \rightarrow 0$ の極限で u_{k0} 、 v_{k0} は発散を引き起こすが ε を有限に保っている限り他の実固有値のモードと同様に扱える。ただし $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限を取り系の対称性を回復させた場合の取り扱いには注意が必要。この場合は BdG の方法と同じく量子座標として扱うことになる。 $\hbar\omega_{kq}^{(+)}$ が複素数になるような場合を考える。ここでのその条件は

$$\cos(\Theta + kd) \left(2|J| \cos(\Theta + kd) \sin^2\left(\frac{qd}{2}\right) + Un_c \right) < 0 \quad (392)$$

であり、 $\hbar\omega_{kq}^L$ が純虚数になる。複素固有値の解析は後で行う。固有値の Bloch 波数 q 依存性を図示したものをつぎに示す (図 3、図 4、図 5、図 6)。

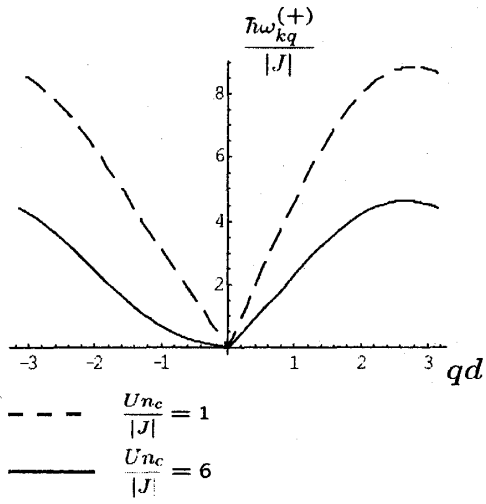


図 3: 固有値 ($\Theta + kd = 0.5$) .

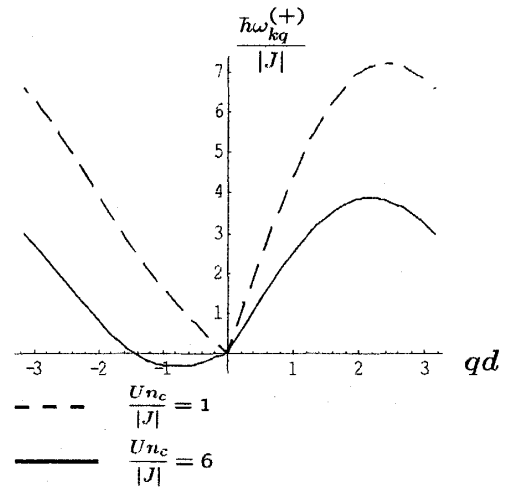


図 4: 固有値 ($\Theta + kd = 1$) .

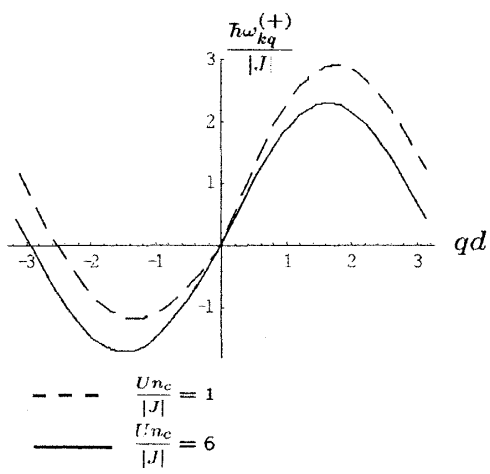


図 5: 固有値 ($\Theta + kd = 1.55$) .

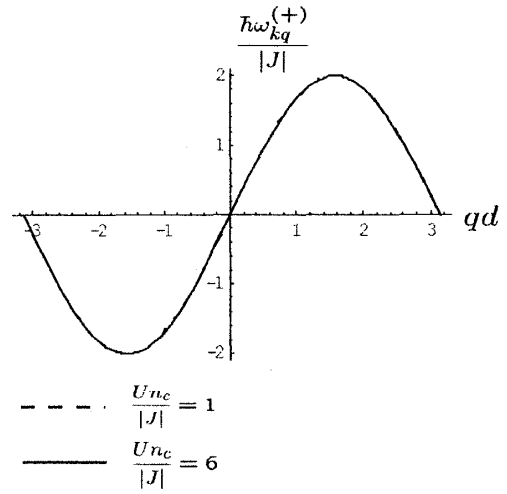


図 6: 固有値 ($\Theta + kd = \frac{\pi}{2}$) .

固有値 $\hbar\omega_{kq}^{(+)}$ が正、負、複素数になるそれぞれのパラメーター領域を図示すると次のようになる (図 7、図 8)。

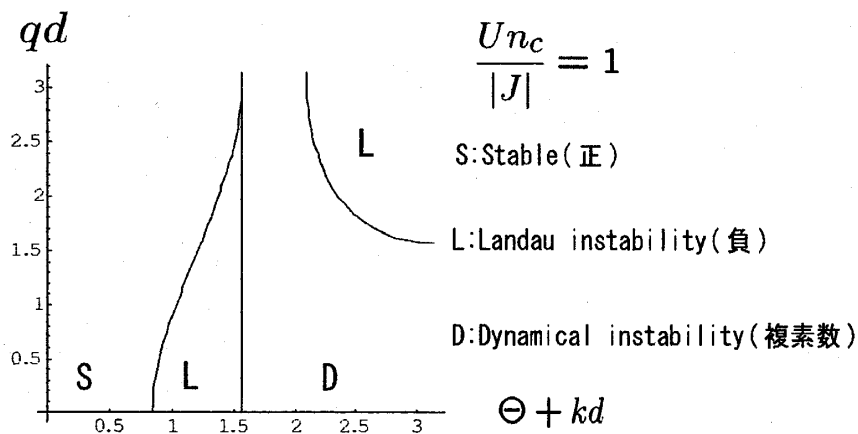


図 7: 相図 $\frac{Un_c}{|J|} = 1$

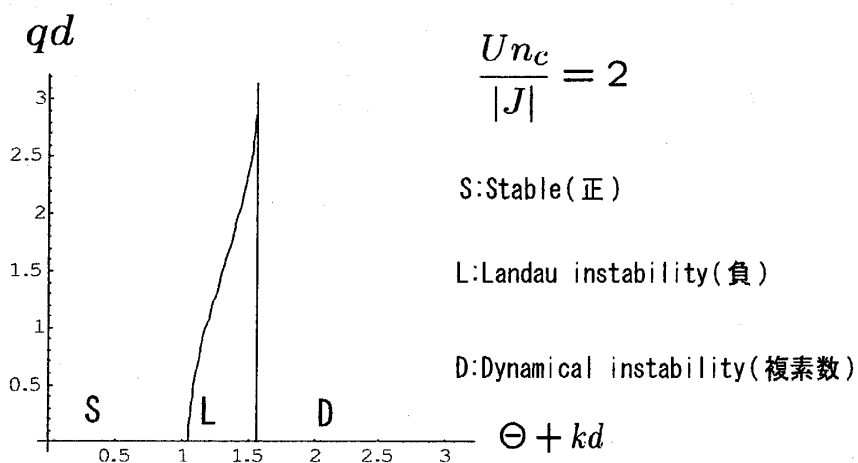


図 8: 相図 $\frac{Un_c}{|J|} = 2$

4.5.4 ハミルトニアンに対角化（実固有値）

ここで実固有値の場合のハミルトニアンの対角化を行う。 $T^{(kq)}$ は以下の正則行列を用いて次のように対角化される。

$$O^{(kq)-1}T^{(kq)}O^{(kq)} = E^{(kq)} \quad (393)$$

ここで正則行列 $O^{(kq)}$ と $E^{(kq)}$ は

$$E^{(kq)} = \begin{pmatrix} \hbar\omega_{kq}^{(+)} & 0 \\ 0 & -\hbar\omega_{k-q}^{(+)} \end{pmatrix} \quad (394)$$

$$O^{(kq)} = \begin{pmatrix} u_{kq}^{(+)} & v_{kq}^{(+)} \\ v_{kq}^{(+)} & u_{kq}^{(+)} \end{pmatrix} \quad (395)$$

$$O^{(kq)-1} = \frac{1}{\det|O^{(kq)}|} \begin{pmatrix} u_{kq}^{(+)} & -v_{kq}^{(+)} \\ -v_{kq}^{(+)} & u_{kq}^{(+)} \end{pmatrix} \quad (396)$$

$$\det|O^{(kq)}| = u_{kq}^{(+)}u_{kq}^{(+)} - v_{kq}^{(+)}v_{kq}^{(+)} = 1 \quad (397)$$

である。上で定義した正則行列を用いて次のような正準変数を定義する。

$$\begin{aligned} \hat{b}_{kq} &= \begin{pmatrix} \hat{b}_{kq} \\ \hat{b}_{k-q}^{\dagger} \end{pmatrix} \\ &= O^{(kq)-1}\hat{c}_{kq} \\ &= \begin{pmatrix} u_{kq}^{(+)} & -v_{kq}^{(+)} \\ -v_{kq}^{(+)} & u_{kq}^{(+)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{kq} \\ \hat{c}_{k-q}^{\dagger} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (398)$$

$$\begin{aligned} \hat{b}_{kq}^{\dagger} &= \begin{pmatrix} \hat{b}_{kq}^{\dagger} & \hat{b}_{k-q} \end{pmatrix} \\ &= \hat{c}_{kq}^{\dagger}\rho_3 O^{(kq)}\rho_3 \\ &= \begin{pmatrix} \hat{c}_{kq}^{\dagger} & \hat{c}_{k-q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{kq}^{(+)} & -v_{kq}^{(+)} \\ -v_{kq}^{(+)} & u_{kq}^{(+)} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (399)$$

ここで定義された正準変数が正準交換関係を満たすことを確かめる。

$$\begin{aligned} [\hat{b}_{kq}, \hat{b}_{kq'}^{\dagger}] &= [u_{kq}^{(+)}\hat{c}_{kq} - v_{kq}^{(+)}\hat{c}_{k-q}^{\dagger}, u_{kq'}^{(+)}\hat{c}_{kq'} - v_{kq'}^{(+)}\hat{c}_{k-q'}^{\dagger}] \\ &= u_{kq}^{(+)}u_{kq'}^{(+)}[\hat{c}_{kq}, \hat{c}_{kq'}^{\dagger}] - v_{kq}^{(+)}v_{kq'}^{(+)}[\hat{c}_{k-q}^{\dagger}, \hat{c}_{k-q'}^{\dagger}] \\ &= (u_{kq}^{(+)}u_{kq'}^{(+)} - v_{kq}^{(+)}v_{kq'}^{(+)})\delta_{qq'} \\ &= \delta_{qq'} \end{aligned} \quad (400)$$

$$\begin{aligned} [\hat{b}_{kq}, \hat{b}_{kq'}] &= [u_{kq}^{(+)}\hat{c}_{kq} - v_{kq}^{(+)}\hat{c}_{k-q}^{\dagger}, u_{kq'}^{(+)}\hat{c}_{kq'} - v_{kq'}^{(+)}\hat{c}_{k-q'}^{\dagger}] \\ &= (-u_{kq}^{(+)}v_{kq'}^{(+)} + v_{kq}^{(+)}u_{kq'}^{(+)})\delta_{q-q'} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (401)$$

このように正準交換関係が成立している。いま正準交換関係の成立に固有ベクトル間の直交関係 (379)、(382) を用いた。上で用いた正則行列と正準変数を用いてハミルトニアンは次のように変形される。

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_0 &= \frac{1}{2} \sum_q \hat{c}_{kq}^\dagger \rho_3 T^{(kq)} \hat{c}_{kq} - \sum_q \frac{1}{2} (\lambda_{kq} + U n_c) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_q \hat{c}_{kq}^\dagger \rho_3 O^{(kq)} \rho_3 O^{(kq)-1} T^{(kq)} O^{(kq)} O^{(kq)-1} \hat{c}_{kq} - \sum_q \frac{1}{2} (\lambda_{kq} + U n_c) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_q \hat{b}_{kq}^\dagger \rho_3 E^{(kq)} \hat{b}_{kq} - \sum_q \frac{1}{2} (\lambda_{kq} + U n_c)
 \end{aligned} \tag{402}$$

となる。ハミルトニアンを行列表示からもとに戻すと

$$\hat{H}_0 = \sum_q \left(\hbar \omega_{kq}^{(+)} \hat{b}_{kq}^\dagger \hat{b}_{kq} + \frac{1}{2} (\hbar \omega_{kq}^{(+)} - \lambda_{kq} - U n_c) \right) \tag{403}$$

となり、ハミルトニアンが対角化されることが解る。つまり実固有値の場合、 $\hbar \omega_{kq}^{(+)}$ は生成消滅演算子 $\hat{b}_{kq}$ に付随する準粒子のエネルギーと解釈できる。次に $\hbar \omega_{kq}^{(+)}$ が複素数になる場合を考察する。

4.5.5 複素固有値

固有値 $\hbar \omega_{kq}$ が複素数となる場合を考える。このとき $\hbar \omega_{kq}^{(\pm)} = \hbar \omega_{kq}^R \pm \hbar \omega_{kq}^L$ の $\hbar \omega_{kq}^L$ の部分が純虚数になる。ここで $\hbar \omega_{kq}^L = i \hbar \omega_{kq}^C$ と定義しておく、 $\hbar \omega_{kq}^C$ は実数である。

$$\text{Re} [\hbar \omega_{kq}^{(\pm)}] = \hbar \omega_{kq}^R \tag{404}$$

$$\text{Im} [\hbar \omega_{kq}^{(\pm)}] = \pm \hbar \omega_{kq}^C \tag{405}$$

$T^{(kq)}$ の二つの複素固有値間には以下の関係がある。

$$\hbar \omega_{kq}^{(+)*} = \hbar \omega_{kq}^{(-)} \tag{406}$$

$$\hbar \omega_{kq}^{(+)*} = -\hbar \omega_{k-q}^{(+)} \tag{407}$$

また

$$\begin{aligned}
 T^{(kq)} x_{kq}^{(+)*} &= \hbar \omega_{kq}^{(+)*} x_{kq}^{(+)*} \\
 &= \hbar \omega_{kq}^{(-)} x_{kq}^{(+)*}
 \end{aligned} \tag{408}$$

であるので、固有ベクトル間の関係として

$$x_{kq}^{(-)} = x_{kq}^{(+)*} \tag{409}$$

を得る。つまり $T^{(kq)}$ の二つの独立な固有ベクトルは複素共役の関係になっている。また、実固有値のときと同様に以下の性質が成り立つ。

$$\mathbf{x}_{k-q}^{(\pm)} = \mathbf{x}_{kq}^{(\pm)} \quad (410)$$

$$\mathbf{x}_{kq}^{(-)} = \rho_1 \mathbf{x}_{kq}^{(+)} \quad (411)$$

$\mathbf{x}_{kq}^{(-)} = \rho_1 \mathbf{x}_{kq}^{(+)}$ と $\mathbf{x}_{kq}^{(-)} = \mathbf{x}_{kq}^{(+)*}$ より次の関係が言える。

$$v_{kq}^{(+)} = u_{kq}^{(+)*} \quad (412)$$

すなわち固有値と固有ベクトルは以下の形になることが解る。

$$\hbar\omega_{kq}^{(+)} \quad \mathbf{x}_{kq}^{(+)} = \begin{pmatrix} u_{kq}^{(+)} \\ u_{kq}^{(+)*} \end{pmatrix} \quad (413)$$

$$\hbar\omega_{kq}^{(+)*} \quad \mathbf{x}_{kq}^{(-)} = \mathbf{x}_{kq}^{(+)*} = \begin{pmatrix} u_{kq}^{(+)*} \\ u_{kq}^{(+)} \end{pmatrix} \quad (414)$$

次に固有ベクトル間の直交関係を見ていく

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{kq}^{(s')\dagger} \rho_3 T^{(kq)} \mathbf{x}_{kq}^{(s)} &= \hbar\omega_{kq}^{(s')*} (\mathbf{x}_{kq}^{(s')\dagger} \rho_3 \mathbf{x}_{kq}^{(s)}) \\ &= \hbar\omega_{kq}^{(s)} (\mathbf{x}_{kq}^{(s')\dagger} \rho_3 \mathbf{x}_{kq}^{(s)}) \end{aligned} \quad (415)$$

より

$$(\hbar\omega_{kq}^{(s')*} - \hbar\omega_{kq}^{(s)}) (\mathbf{x}_{kq}^{(s')\dagger} \rho_3 \mathbf{x}_{kq}^{(s)}) = 0 \quad (416)$$

が得られる。そして、 $s' = s = \pm$ の場合

$$(\mathbf{x}_{kq}^{(\pm)\dagger} \rho_3 \mathbf{x}_{kq}^{(\pm)}) = 0 \quad (417)$$

とならねばならないことが解る。BdG 方程式におけるゼロノルムに対応する関係式であるといえる。固有ベクトル (413)、(414) は確かに満たしている。次に $s' \neq s$ の場合、 $s' = \pm$ 、 $s = \mp$ を考える。

$$(\hbar\omega_{kq}^{(\pm)*} - \hbar\omega_{kq}^{(\mp)}) (\mathbf{x}_{kq}^{(\pm)\dagger} \rho_3 \mathbf{x}_{kq}^{(\mp)}) = 0 \quad (418)$$

ここで $\hbar\omega_{kq}^{(\pm)*} = \hbar\omega_{kq}^{(\mp)}$ より

$$(\mathbf{x}_{kq}^{(\pm)\dagger} \rho_3 \mathbf{x}_{kq}^{(\mp)}) = (\text{定数}) \quad (419)$$

となる、これは BdG における異なる固有ベクトル間での非直交の関係式に対応するといえる。いま

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}_{kq}^{(-)\dagger} \rho_3 \mathbf{x}_{kq}^{(+)}) &= u_{kq}^{(+)} u_{kq}^{(+)} - u_{kq}^{(+)*} u_{kq}^{(+)*} \\ &= i \end{aligned} \quad (420)$$

と規格化しておく。 $(x_{kq}^{(-)\dagger} \rho_3 x_{kq}^{(+)}) = u_{kq}^{(+)} u_{kq}^{(+)} - u_{kq}^{(+)*} u_{kq}^{(+)*}$ が純虚数になる形をしているため、このように規格化した。ここで固有ベクトル $u_{kq}^{(+)}, u_{kq}^{(+)*}$ は

$$u_{kq}^{(+)} = \frac{Un_c e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{(Un_c)^2 - \left(\frac{\lambda_{kq} + \lambda_{k-q}}{2} - \hbar\omega_{kq}^L + Un_c\right)^2}} \quad (421)$$

$$u_{kq}^{(+)*} = \frac{\left(\frac{\lambda_{kq} + \lambda_{k-q}}{2} - \hbar\omega_{kq}^L - Un_c\right) e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{(Un_c)^2 - \left(\frac{\lambda_{kq} + \lambda_{k-q}}{2} - \hbar\omega_{kq}^L + Un_c\right)^2}} \quad (422)$$

である。

4.5.6 演算子の変換

複素固有値が現れた場合に c_{kq} はどのような演算子に変換されるかを考える。まず、次のような正則行列を定義する。

$$O^{(kq)} = \begin{pmatrix} u_{kq}^{(+)} & iu_{kq}^{(+)*} \\ u_{kq}^{(+)*} & iu_{kq}^{(+)} \end{pmatrix} \quad (423)$$

$$O^{(kq)-1} = \frac{1}{\det O^{(kq)}} \begin{pmatrix} iu_{kq}^{(+)} & -iu_{kq}^{(+)*} \\ -u_{kq}^{(+)*} & u_{kq}^{(+)} \end{pmatrix} \quad (424)$$

$$\det O^{(kq)} = i(u_{kq}^{(+)} u_{kq}^{(+)} - u_{kq}^{(+)*} u_{kq}^{(+)*}) = -1 \quad (425)$$

この正則行列を用いて次のような演算子を定義する。

$$O^{(kq)-1} \hat{c}_{kq} = - \begin{pmatrix} iu_{kq}^{(+)} & -iu_{kq}^{(+)*} \\ -u_{kq}^{(+)*} & u_{kq}^{(+)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{kq} \\ \hat{c}_{k-q}^\dagger \end{pmatrix} \quad (426)$$

$$= \begin{pmatrix} -\hat{A}_{kq} \\ \hat{B}_{k-q}^\dagger \end{pmatrix} \quad (427)$$

ここで定義された $\hat{A}_{kq}, \hat{B}_{kq}^\dagger$ には次の性質がある。

$$\hat{A}_{kq} = \hat{A}_{k-q}^\dagger \quad (428)$$

$$\hat{B}_{kq} = -\hat{B}_{k-q}^\dagger \quad (429)$$

また交換関係は

$$\begin{aligned} [\hat{A}_{kq}, \hat{B}_{kq'}^\dagger] &= i[u_{kq}^{(+)} \hat{c}_{kq} - u_{kq}^{(+)*} \hat{c}_{k-q}^\dagger, u_{kq'}^{(+)*} \hat{c}_{k-q'} - u_{kq'}^{(+)} \hat{c}_{kq'}^\dagger] \\ &= -i[\hat{c}_{kq}, \hat{c}_{kq'}^\dagger] u_{kq}^{(+)} u_{kq'}^{(+)} - i[\hat{c}_{kq}, \hat{c}_{kq'}^\dagger] u_{kq}^{(+)*} u_{kq'}^{(+)*} \\ &= -i(u_{kq}^{(+)} u_{kq'}^{(+)} - u_{kq}^{(+)*} u_{kq'}^{(+)*}) \delta_{qq'} \\ &= \delta_{qq'} \end{aligned} \quad (430)$$

また同じことであるが

$$[\hat{A}_{kq}, \hat{B}_{k-q'}] = -\delta_{qq'} \quad (431)$$

となる。また

$$\begin{aligned} [\hat{A}_{kq}, \hat{A}_{kq'}^\dagger] &= [iu_{kq}^{(+)}\hat{c}_{kq} - iu_{kq}^{(+)*}\hat{c}_{k-q}^\dagger, iu_{kq'}^{(+)}\hat{c}_{k-q'} - iu_{kq'}^{(+)*}\hat{c}_{kq'}^\dagger] \\ &= [\hat{c}_{kq}, \hat{c}_{kq'}^\dagger]u_{kq}^{(+)}u_{kq'}^{(+)*} + [\hat{c}_{k-q}^\dagger, \hat{c}_{k-q'}]u_{kq}^{(+)*}u_{kq'}^{(+)} \\ &= (u_{kq}^{(+)}u_{kq'}^{(+)*} - u_{kq}^{(+)*}u_{kq'}^{(+)})\delta_{qq'} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (432)$$

$$\begin{aligned} [\hat{B}_{kq}, \hat{B}_{kq'}^\dagger] &= [-u_{kq}^{(+)}\hat{c}_{k-q}^\dagger + u_{kq}^{(+)*}\hat{c}_{kq}, -u_{kq'}^{(+)*}\hat{c}_{k-q'} + u_{kq'}^{(+)}\hat{c}_{kq'}^\dagger] \\ &= [\hat{c}_{k-q}^\dagger, \hat{c}_{k-q'}]u_{kq}^{(+)}u_{kq'}^{(+)*} + [\hat{c}_{kq}, \hat{c}_{kq'}^\dagger]u_{kq}^{(+)*}u_{kq'}^{(+)} \\ &= (u_{kq}^{(+)*}u_{kq'}^{(+)} - u_{kq}^{(+)}u_{kq'}^{(+)*})\delta_{qq'} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (433)$$

も同様に得られる。以上で得られた交換関係をまとめると以下ようになる。

$$[\hat{A}_{kq}, \hat{B}_{kq'}^\dagger] = \delta_{qq'}, \quad [\hat{A}_{kq}, \hat{B}_{k-q'}] = -\delta_{qq'}, \quad [\hat{A}_{kq}, \hat{A}_{kq'}^\dagger] = 0, \quad [\hat{B}_{kq}, \hat{B}_{kq'}^\dagger] = 0 \quad (434)$$

ここで定義された演算子はボゾン型の生成消滅演算子の交換関係を満たしていないことが解る。ここでは実固有値の場合の変換と本質的に同じ手順の変換を行ったが、複素固有値が現れる状況では交換関係が決定的に異なる。

4.5.7 ハミルトニアン「対角化」(複素固有値)

正則行列 $O^{(kq)-1}$ 、 $O^{(kq)}$ は $T^{(kq)}$ を次のように対角化する。

$$\begin{aligned} O^{(kq)-1}T^{(kq)}O^{(kq)} &= E^{(kq)} \\ &= \begin{pmatrix} \hbar\omega_{kq}^{(+)} & 0 \\ 0 & \hbar\omega_{kq}^{(+)*} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (435)$$

また関係式

$$\hat{c}_{kq}^\dagger \rho_3 O^{(kq)} \rho_3 = \begin{pmatrix} \hat{B}_{k-q} & \hat{A}_{kq}^\dagger \end{pmatrix} \quad (436)$$

から、ハミルトニアンは次のようになる。

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_0 &= \frac{1}{2} \sum_q \hat{c}_{kq}^T \rho_3 T^{(kq)} \hat{c}_{kq} - \sum_q \frac{1}{2} (\lambda_{kq} + U n_c) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_q \hat{c}_{kq}^T \rho_3 O^{(kq)} \rho_3 \rho_3 O^{(kq)-1} T^{(kq)} O^{(kq)} O^{(kq)-1} \hat{c}_{kq} - \sum_q \frac{1}{2} (\lambda_{kq} + U n_c) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_q \begin{pmatrix} \hat{B}_{k-q} & \hat{A}_{kq}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hbar\omega_{kq}^{(+)} & 0 \\ 0 & -\hbar\omega_{kq}^{(+)*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\hat{A}_{kq} \\ \hat{B}_{k-q}^\dagger \end{pmatrix} - \sum_q \frac{1}{2} (\lambda_{kq} + U n_c) \\
 &= -\frac{1}{2} \sum_q \hbar\omega_{kq}^{(+)} \hat{B}_{k-q} \hat{A}_{kq} + \hbar\omega_{kq}^{(+)*} \hat{A}_{kq}^\dagger \hat{B}_{k-q}^\dagger - \sum_q \frac{1}{2} (\lambda_{kq} + U n_c) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_q \hbar\omega_{kq}^{(+)} \hat{B}_{kq}^\dagger \hat{A}_{kq} + \hbar\omega_{kq}^{(+)*} \hat{A}_{kq}^\dagger \hat{B}_{kq} - \sum_q \frac{1}{2} (\lambda_{kq} + U n_c) \tag{437}
 \end{aligned}$$

これを見ると、ハミルトニアンは通常の意味で対角化されておらず、調和振動子の代数と結びつかない。よって複素固有値 $\hbar\omega_{kq}^{(+)}$ を準粒子のエネルギースペクトルと解釈することはできないことが解る。ここで演算子 $\hat{A}_{kq}(t)$ 、 $\hat{B}_{kq}(t)$ の時間依存性は

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_{kq}(t) = [\hat{A}_{kq}(t), \hat{H}_0] = \hbar\omega_{kq}^{(+)} \hat{A}_{kq}(t) \tag{438}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{B}_{kq}(t) = [\hat{B}_{kq}(t), \hat{H}_0] = \hbar\omega_{k-q}^{(+)*} \hat{B}_{kq}(t) \tag{439}$$

より

$$\hat{A}_{kq}(t) = e^{-i\omega_{kq}^{(+)} t} \hat{A}_{kq}, \quad \hat{B}_{kq}(t) = e^{-i\omega_{k-q}^{(+)*} t} \hat{B}_{kq} \tag{440}$$

となる。全てのモードを考慮に入れたハミルトニアンは次のように対角化されることになる。ここで実固有値のモードに対しては q_r とし、複素固有値のモードに関して q_c としておく。

$$\hat{H}_0 = \sum_{q_r} \hbar\omega_{kq_r}^{(+)} \hat{b}_{kq_r}^\dagger \hat{b}_{kq_r} + \frac{1}{2} \sum_{q_c} \left(\hbar\omega_{kq_c}^{(+)} \hat{B}_{kq_c}^\dagger \hat{A}_{kq_c} + \hbar\omega_{kq_c}^{(+)*} \hat{A}_{kq_c}^\dagger \hat{B}_{kq_c} \right) + (\text{定数}) \tag{441}$$

$\hat{b}_{kq_r}$ 、 $\hat{A}_{kq_c}$ 、 $\hat{B}_{kq_c}$ と $\hat{c}_q$ は次のような関係でつながっている。

$$\hat{c}_{kq_r} = u_{kq_r} \hat{b}_{kq_r} + v_{kq_r} \hat{b}_{k-q_r}^\dagger \tag{442}$$

$$\hat{c}_{kq_c} = -u_{kq_c} \hat{A}_{kq_c} + i u_{kq_c}^* \hat{B}_{k-q_c}^\dagger \tag{443}$$

これらの演算子を用いると、量子場 $\hat{\phi}(x)$ は次のよう展開されることが解る。

$$\begin{aligned}
 \hat{\phi}(x) &= \sum_{q_r} \left(u_{kq_r} \hat{b}_{kq_r} e^{-i\omega_{kq_r}^{(+)} t} + v_{kq_r} \hat{b}_{k-q_r}^\dagger e^{i\omega_{k-q_r}^{(+)} t} \right) e^{ikx} f_{kq_r}(x) \\
 &+ \sum_{q_c} \left(-u_{kq_c} \hat{A}_{kq_c} e^{-i\omega_{kq_c}^{(+)} t} + i u_{kq_c}^* \hat{B}_{k-q_c}^\dagger e^{i\omega_{k-q_c}^{(+)} t} \right) e^{ikx} f_{kq_c}(x) \tag{444}
 \end{aligned}$$

これは第1バンド内での正準交換関係

$$[\hat{\phi}(x, t), \hat{\phi}^\dagger(x', t)] = \delta(x - x') \quad (445)$$

$$[\hat{\phi}(x, t), \hat{\phi}(x', t)] = [\hat{\phi}^\dagger(x, t), \hat{\phi}^\dagger(x', t)] = 0 \quad (446)$$

を満たす展開となっていることが確かめられる。

4.5.8 Bogoliubov-de Gennes 方程式の固有関数の直交関係との対応

$T^{(kq)} \mathbf{x}_{kq} = \hbar\omega_{kq} \mathbf{x}_{kq}$ の固有値が複素数になる領域で、ハミルトニアンが如何に対角化されるかを論じた。その際、「対角化」されたハミルトニアンは調和振動子の代数と結びつかず、複素固有値は準粒子のエネルギースペクトルとは解釈できないことを示した。また $T^{(kq)} \mathbf{x}_{kq} = \hbar\omega_{kq} \mathbf{x}_{kq}$ の固有ベクトル $\mathbf{x}_{kq}$ 間の直交関係が BdG 方程式の固有関数の直交関係と類似の構造を持つことに触れた。ここでは強結合近似の元で求めた量子場の展開 (444) に現れる関数が、BdG の固有関数の直交関係と一致していることを示す。BdG の方法での量子場の展開 (193) と同様に、強結合近似の元での量子場の展開 (444) を doublet 表記で書くと以下のようになる。

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}(x) = & \sum_{q_r} \left(\mathbf{y}_{kq_r}(x) \hat{b}_{kq_r} e^{-i\omega_{kq_r} t} + \mathbf{z}_{kq_r}(x) \hat{b}_{kq_r}^\dagger e^{i\omega_{kq_r} t} \right) \\ & + \sum_{q_c} \left(-i\xi_{kq_c}(x) \hat{A}_{kq_c} e^{-i\omega_{kq_c} t} + \eta_{kq_c}(x) \hat{B}_{kq_c}^\dagger e^{-i\omega_{kq_c}^* t} \right) \end{aligned} \quad (447)$$

ここで式 (407)、(410)、(428)、(429) を用いた。また

$$\hat{\Phi}(x) = \begin{pmatrix} \hat{\phi}(x) \\ \hat{\phi}^\dagger(x) \end{pmatrix} \quad (448)$$

$$\mathbf{y}_{kq_r}(x) = \begin{pmatrix} u_{kq_r}^{(+)} e^{ikx} f_{kq_r}(x) \\ v_{kq_r}^{(+)} e^{-ikx} f_{k-q_r}^*(x) \end{pmatrix} \quad \mathbf{z}_{kq_r}(x) = \begin{pmatrix} v_{kq_r}^{(+)} e^{ikx} f_{k-q_r}(x) \\ u_{kq_r}^{(+)} e^{-ikx} f_{kq_r}^*(x) \end{pmatrix} \quad (449)$$

$$\xi_{kq_c}(x) = \begin{pmatrix} -iu_{kq_c}^{(+)} e^{ikx} f_{kq_c}(x) \\ -iu_{kq_c}^{(+)*} e^{-ikx} f_{k-q_c}^*(x) \end{pmatrix} \quad \eta_{kq_c}(x) = \begin{pmatrix} iu_{kq_c}^{(+)*} e^{ikx} f_{k-q_c}(x) \\ iu_{kq_c}^{(+)} e^{-ikx} f_{kq_c}^*(x) \end{pmatrix} \quad (450)$$

である。 $\mathbf{y}_{kq_r}(x)$ 、 $\mathbf{z}_{kq_r}(x)$ は実固有値に属する関数であり、 $\xi_{kq_c}(x)$ 、 $\eta_{kq_c}(x)$ は複素固有値に属する関数である。ここで実固有値に属する関数 $\mathbf{y}_{kq_r}(x)$ 、 $\mathbf{z}_{kq_r}(x)$

$$\mathbf{z}_{kq_r}(x) = \rho_1 \mathbf{y}_{kq_r}^*(x) \quad (451)$$

という関係を持つ。これは BdG 方程式の固有関数が満たす性質 (157) と対応していることが解る。BdG 方程式で定義した「内積」(162) を用いて、 $\mathbf{y}_{kq_r}(x)$ 、 $\mathbf{z}_{kq_r}(x)$ 、 $\xi_{kq_c}(x)$ 、 $\eta_{kq_c}(x)$ 間の直交関係を調べる。まず $\mathbf{y}_{kq_r}(x)$ 、 $\mathbf{z}_{kq_r}(x)$ 間の直交関係は

$$(\mathbf{y}_{kq_r}(x), \mathbf{y}_{kq'_r}(x)) = (u_{kq_r}^{(+)} u_{kq'_r}^{(+)} - v_{kq_r}^{(+)} v_{kq'_r}^{(+)}) \delta_{q_r q'_r} = \delta_{q_r q'_r} \quad (452)$$

$$(\mathbf{z}_{kq_r}(x), \mathbf{z}_{kq'_r}(x)) = (v_{kq_r}^{(+)} v_{kq'_r}^{(+)} - u_{kq_r}^{(+)} u_{kq'_r}^{(+)}) \delta_{q_r q'_r} = -\delta_{q_r q'_r} \quad (453)$$

$$(\mathbf{z}_{kq_r}(x), \mathbf{y}_{kq'_r}(x)) = (u_{kq_r}^{(+)} v_{kq'_r}^{(+)} - v_{kq_r}^{(+)} u_{kq'_r}^{(+)}) \delta_{q_r - q'_r} = 0 \quad (454)$$

となる。これは BdG 方程式の固有関数間の直交関係 (167)、(168)、(171) と一致している。次に $\xi_{kq_c}(x)$ 、 $\eta_{kq_c}(x)$ 間の直交関係は

$$(\xi_{kq_c}(x), \xi_{kq'_c}(x)) = (u_{kq_c}^{(+)*} u_{kq'_c}^{(+)} - u_{kq_c}^{(+)} u_{kq'_c}^{(+)*}) \delta_{q_c q'_c} = 0 \quad (455)$$

$$(\eta_{kq_c}(x), \eta_{kq'_c}(x)) = (u_{kq_c}^{(+)} u_{kq'_c}^{(+)*} - u_{kq_c}^{(+)*} u_{kq'_c}^{(+)}) \delta_{q_c q'_c} = 0 \quad (456)$$

$$(\xi_{kq_c}(x), \eta_{kq'_c}(x)) = -(u_{kq_c}^{(+)*} u_{kq'_c}^{(+)*} - u_{kq_c}^{(+)} u_{kq'_c}^{(+)}) \delta_{q_c - q'_c} = i \delta_{q_c - q'_c} \quad (457)$$

$$(\eta_{kq_c}(x), \xi_{kq'_c}(x)) = -(u_{kq_c}^{(+)} u_{kq'_c}^{(+)} - u_{kq_c}^{(+)*} u_{kq'_c}^{(+)*}) \delta_{q_c - q'_c} = -i \delta_{q_c - q'_c} \quad (458)$$

となることが解る。式 (455)、(456) は BdG 方程式の固有関数のゼロノルム (209) に一致している。また式 (457)、(458) は異なる固有値に属する固有値間の非直交関係 (211) に一致することが解る。これらの直交関係の一致から $T^{(kq)} \mathbf{x}_{kq} = \hbar \omega_{kq} \mathbf{x}_{kq}$ の固有値が複素数になる場合と、BdG 方程式の固有値が複素数になる条件が同一のものであることが結論づけられる。

5 まとめと展望

本論文では光学格子に閉じ込められた中性原子の Bose-Einstein 凝縮に焦点を当て、場の量子論に基づいた解析を行った。この研究で試みた事とその結果を以下に述べる。

第 2 章では中性原子気体の作用とハミルトニアンを与え、自発的対称性の破れに基づき秩序変数を導入した。ここで対称性を微小に破る項 (breaking term) を導入した。breaking term のおかげで赤外部の正則化が行え、後に Ward-高橋恒等式の議論が可能になる。また秩序変数が従う Gross-Pitaevskii 方程式の導出を自己無撞着に行った。

第 3 章では非摂動ハミルトニアンを対角化するのに一般化された Bogoliubov 変換を用いて対角化を行った。この場合は凝縮体に流れが存在せず、凝縮体を実数とした。一般化された Bogoliubov 変換を用いた方法では場の量子論の基礎である正準交換関係が満たされていることを確認した。次に Bogoliubov-de Gennes の方法を用いて非摂動ハミルトニアンの対角化を行った。まず、凝縮体に流れが存在し、BdG 方程式の固有値が実である場合の対角化を行った。BdG 方程式も正準交換関係を満たす場の展開が得られるが、ゼロモードに関しては量子座標として扱うことになる。次に BdG 方程式の固有値が複素数になる場合に BdG 方程式の固有関数間の直交関係について述べた。

第 4 章では強結合近似のもとで非摂動ハミルトニアンの対角化を行った。強結合近似のもとで得られた準粒子とその真空が、元々系が持つ位相変換不変性を維持したものであることを確かめるため Ward-高橋恒等式の成立を確かめた。次に凝縮体に流れがある状況下での強結合近似を行い、ノーマルモードの方法を用いてハミルトニアンの対角化を行った。その際、運動方程式 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{c}_{kq} = T^{(kq)} \hat{c}_{kq}$ を解くにあたり、固有値方程式 $T^{(kq)} \mathbf{x}_{kq} = \hbar \omega_{kq} \mathbf{x}_{kq}$ の固有値 $\hbar \omega_{kq}$ が実数の場合にはハミルトニアンは対角化され固有値 $\hbar \omega_{kq}$ は準粒子のエネルギーとみなせることを示した。また固有値 $\hbar \omega_{kq}$ が複素数になるパラメータ領域が存在し、その場合に「対角化」されたハミルトニアンは調和振動子の代数と結びつかず Fock 空間で表現できないことを示した。よって複素固有値は準粒子が

持つエネルギースペクトルとは言えないことが解った。また BdG 方程式の固有関数間の直交関係と強結合近似の元で得られた量子場の展開に現れる関数を持つ直交関係が一致することを示した。このことにより強結合近似のもとで複素固有値が現れハミルトニアンが対角化されないパラメーター領域と BdG 方程式において複素固有値が生じる条件が一致していることが解った。

本研究では光学格子に閉じ込められた中性原子気体の Bose-Einstein 凝縮において、場の理論的な観点から、如何に量子場の正準交換関係を保ち、非摂動ハミルトニアンを対角化するかということに焦点を当てた。本論の後半に於いて光学格子において凝縮体に流れが存在する場合の解析を行うために強結合近似を用いた。その場合、非摂動ハミルトニアンが通常の意味では対角化できない領域が存在することを示した。この状況が Bogoliubov-de Gennes 方程式の固有値が複素数になる条件と一致することも解ったが、Bogoliubov-de Gennes 方程式の固有値が複素数になるのは光学格子の系に限った事ではなく多重渦度を持つ BEC 等の凝縮体に流れが存在する場合には一般に起こりうることである。本研究ではその様な状況においては、多くの研究で言われるように、複素エネルギーが現れるわけではないことを示した。ただし複素固有値が存在する場合の物理的な意味についての知見が得られたわけではない。今後の課題として、複素固有値が存在する場合に凝縮体にどのようなダイナミクスを与えるのか明らかにしていきたい。

付録 A 量子補正 (Hartree-Fock-Bogoliubov-Popov 近似)

光学格子中の BEC に強結合近似を行う際に粒子が局在しているような状況を想定して行った。そのため粒子間は強く相関していることになるためハミルトニアンの高次の項を考慮に入れる必要がある。ここでは量子補正として Hartree-Fock-Bogoliubov-Popov 近似という平均場近似を用いてハミルトニアンの高次の項の寄与を取り入れる。ここで GP 方程式の解 $v(\mathbf{x})$ は実とする。

付録 A.1 Hartree-Fock-Bogoliubov-Popov 近似

ハミルトニアン

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 = & \int d^3x \left[\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})(K + V - \mu)\hat{\phi}(\mathbf{x}) \right. \\ & \left. + \frac{g}{2}(4v^2(\mathbf{x})\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x}) + v^2(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x})^2 + v^2(\mathbf{x})\hat{\phi}^{\dagger 2}(\mathbf{x})) \right] \quad (459)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_I = & \hat{H}_I^{(1)} + \hat{H}_I^{(3)} + \hat{H}_I^{(4)} \\ = & \int d^3x \left[v(\mathbf{x}) (K + V - \mu + gv^2(\mathbf{x}) - \varepsilon\bar{\varepsilon}) \hat{\phi}(\mathbf{x}) \right. \\ & + \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) (K + V - \mu + gv^2(\mathbf{x}) - \varepsilon\bar{\varepsilon}) v(\mathbf{x}) \\ & + g \left(v(\mathbf{x})\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x}) + v(\mathbf{x})\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x}) \right) \\ & \left. + \frac{g}{2}\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x}) \right] \quad (460)\end{aligned}$$

に対して Hartree-Fock-Bogoliubov 近似を行う

$$\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x}) \simeq \langle \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \rangle \hat{\phi}(\mathbf{x}) + 2\langle \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x}) \rangle \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \quad (461)$$

$$\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x}) \simeq \langle \hat{\phi}(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x}) \rangle \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) + 2\langle \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x}) \rangle \hat{\phi}(\mathbf{x}) \quad (462)$$

$$\begin{aligned}\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x}) \simeq & 4\langle \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x}) \rangle \hat{\phi}(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x}) \\ & + \langle \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \rangle \hat{\phi}(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x}) + \langle \hat{\phi}(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x}) \rangle \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \quad (463)\end{aligned}$$

Hartree-Fock-Bogoliubov 近似ではトラップをなくす極限でエネルギースペクトルにギャップが現れてしまうことが解っており、南部-Goldstone の定理を破る近似である。そこで Popov 近似 [45] を行う。次の 2 項を落とす。

$$\langle \hat{\phi}(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x}) \rangle \quad (464)$$

$$\langle \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \rangle \quad (465)$$

このときハミルトニアンは次のようになる。

$$\begin{aligned}
 \hat{H} = & \int d^3x \left[v(\mathbf{x}) \left(K + V - \mu - \varepsilon \bar{\varepsilon} + g \left\{ v^2(\mathbf{x}) + 2\langle \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\phi}(\mathbf{x}) \rangle \right\} \right) \hat{\phi}(\mathbf{x}) \right. \\
 & + \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \left(K + V - \mu - \varepsilon \bar{\varepsilon} + g \left\{ v^2(\mathbf{x}) + 2\langle \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\phi}(\mathbf{x}) \rangle \right\} \right) v(\mathbf{x}) \\
 & + \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \left(K + V - \mu + g \left\{ v^2(\mathbf{x}) + 2\langle \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\phi}(\mathbf{x}) \rangle \right\} \right) \hat{\phi}(\mathbf{x}) \\
 & \left. + \frac{g}{2} v^2(\mathbf{x}) \left(\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\phi}(\mathbf{x}) + \hat{\phi}(\mathbf{x}) \hat{\phi}(\mathbf{x}) + \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \right) \right] \quad (466)
 \end{aligned}$$

ここで HFBP 近似のもとでの GP 方程式は次のようになる。

$$\left(K + V - \mu - \varepsilon \bar{\varepsilon} + g \left\{ v^2(\mathbf{x}) + 2\langle \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\phi}(\mathbf{x}) \rangle \right\} \right) v(\mathbf{x}) = 0 \quad (467)$$

つぎのような 1 体の Schrödinger 方程式を考える。

$$\left(K + V - \mu - \varepsilon \bar{\varepsilon} + g \left\{ v^2(\mathbf{x}) + 2\langle \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\phi}(\mathbf{x}) \rangle \right\} \right) f_q(\mathbf{x}) = \epsilon_q f_q(\mathbf{x}) \quad (468)$$

ここで $f_q(\mathbf{x})$ は Bloch 条件を満たす解

$$f_q(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \bar{f}_q(\mathbf{x}) \quad (469)$$

$$\bar{f}_q(\mathbf{x} + \mathbf{G}) = \bar{f}_q(\mathbf{x}) \quad (470)$$

である。次に強結合近似のもとで非摂動ハミルトニアンを対角化した時の量子場の展開との類推で

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}) = \sum_q \left(u_q f_q(\mathbf{x}) \hat{b}_q - v_q f_q^*(\mathbf{x}) \hat{b}_q^\dagger \right) \quad (471)$$

$$\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_q \left(u_q f_q^*(\mathbf{x}) \hat{b}_q^\dagger - v_q f_q(\mathbf{x}) \hat{b}_q \right) \quad (472)$$

とする。ここで

$$\langle \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\phi}(\mathbf{x}) \rangle = \sum_q v_q^2 f_q(\mathbf{x}) f_q^*(\mathbf{x}) \quad (473)$$

となる。Bloch 条件をみたす関数 $f_q(\mathbf{x})$ から作られた Wannier 関数を用いて $f_q(\mathbf{x})$ と GP 方程式の解は

$$f_q(\mathbf{x}) = I_s^{-1/2} \sum_i e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i} w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (474)$$

$$v(\mathbf{x}) = \left(\frac{N_c}{I_s} \right)^{1/2} \sum_i w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) = n_c^{1/2} \sum_i w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (475)$$

と書ける。これを GP 方程式に代入し左辺から $w_{i_1}(\mathbf{x})$ を掛け積分を行うと次の式が得られる。

$$\sum_{i_2} \left(\int d^3x w_{i_1}(\mathbf{x})(K+V)w_{i_2}(\mathbf{x}) \right) - \mu - \varepsilon \bar{\varepsilon} + \sum_{i_2, i_3, i_4} \left[gn_c + 2g \frac{v_q^2}{I_s} e^{iq \cdot (x_{i_2} - x_{i_3})} \right] \left(\int d^3x w_{i_1}(\mathbf{x})w_{i_2}(\mathbf{x})w_{i_3}(\mathbf{x})w_{i_4}(\mathbf{x}) \right) = 0 \quad (476)$$

強結合近似を行うことにより化学ポテンシャルは

$$\mu = -2(\text{dim}) \times J + z + U \left(n_c + 2 \sum_q \frac{v_q^2}{I_s} \right) - \varepsilon \bar{\varepsilon} \quad (\text{dim} = 1, 2, 3) \quad (477)$$

となる。ここで

$$z = \int d^3x w_i(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{opt}(\mathbf{x}) \right) w_i(\mathbf{x}) \quad (478)$$

$$J = - \int d^3x w_i(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{opt}(\mathbf{x}) \right) w_{i+1}(\mathbf{x}) \quad (479)$$

$$U = g \int d^3x w_i(\mathbf{x})w_i(\mathbf{x})w_i(\mathbf{x})w_i(\mathbf{x}) \quad (480)$$

である。

付録 A.2 ハミルトニアンに対角化

$\phi(\mathbf{x}) = \sum_i \hat{a}_i w_i(\mathbf{x})$ と展開する。

$$\begin{aligned} \hat{H} = \int d^3x & \left[\sum_{i_1, i_2} \left(w_{i_1}(\mathbf{x})(K+V)w_{i_2}(\mathbf{x}) - \mu \right. \right. \\ & + g \sum_{i_3, i_4} \left[n_c + 2 \sum_q \frac{v_q^2}{I_s} e^{iq \cdot (x_{i_3} - x_{i_4})} \right] w_{i_1}(\mathbf{x})w_{i_2}(\mathbf{x})w_{i_3}(\mathbf{x})w_{i_4}(\mathbf{x}) \left. \right) \hat{a}_{i_1}^\dagger \hat{a}_{i_2} \\ & + \sum_{i_1, i_2, i_3, i_4} \frac{gn_c}{2} w_{i_1}(\mathbf{x})w_{i_2}(\mathbf{x})w_{i_3}(\mathbf{x})w_{i_4}(\mathbf{x}) \left(\hat{a}_{i_1}^\dagger \hat{a}_{i_2} + \hat{a}_{i_1} \hat{a}_{i_2} + \hat{a}_{i_1}^\dagger \hat{a}_{i_2}^\dagger \right) \left. \right] \end{aligned} \quad (481)$$

強結合近似を行う

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \sum_i \left(\left(z - \mu + U \left[n_c + \sum_q 2 \frac{v_q^2}{I_s} \right] \right) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{Un_c}{2} (2\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger) \right) \quad (482)$$

ここで

$$\mu = -6 \times J + z + U \left(n_c + 2 \sum_q \frac{v_q^2}{I_s} \right) - \varepsilon \bar{\varepsilon} \quad (483)$$

$$\hat{a}_i = I_s^{-1/2} \sum_q \hat{c}_q e^{iq \cdot x_i} \quad (484)$$

$$\hat{a}_i^\dagger = I_s^{-1/2} \sum_q \hat{c}_q^\dagger e^{-iq \cdot x_i} \quad (485)$$

を代入する。

$$\hat{H} = \sum_q \epsilon_q \hat{c}_q^\dagger \hat{c}_q + \sum_q \frac{U n_c}{2} \left(2 \hat{c}_q^\dagger \hat{c}_q + \hat{c}_{-q} \hat{c}_q + \hat{c}_{-q}^\dagger \hat{c}_q^\dagger \right) \quad (486)$$

$$\epsilon_q = 2J \left(3 - \sum_{i=x,y,z} \cos(q_i d) \right) + \varepsilon \bar{\varepsilon} \quad (487)$$

次のような Bogoliubov 変換で対角化できる。

$$\hat{b}_q = u_q \hat{c}_q + v_q \hat{c}_{-q}^\dagger \quad (488)$$

$$\hat{b}_q^\dagger = u_q \hat{c}_q^\dagger + v_q \hat{c}_{-q} \quad (489)$$

$$u_q^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_q + U n_c}{\sqrt{(\epsilon_q + U n_c)^2 - (U n_c)^2}} \right) \quad (490)$$

$$v_q^2 = \frac{1}{2} \left(-1 + \frac{\epsilon_q + U n_c}{\sqrt{(\epsilon_q + U n_c)^2 - (U n_c)^2}} \right) \quad (491)$$

ハミルトニアンは次のように対角化される。

$$\hat{H} = \sum_q \left(E_q \hat{b}_q^\dagger \hat{b}_q + (\epsilon_q + U n_c) v_q^2 - U n_c u_q v_q \right) \quad (492)$$

$$\begin{aligned} E_q &= \sqrt{\epsilon_q^2 + 2U n_c \epsilon_q} \\ &= \sqrt{\left(2J \left[3 - \sum_{i=x,y,z} \cos(q_i d) \right] \right)^2 + 2(U n_c + \varepsilon \bar{\varepsilon}) 2J \left(3 - \sum_{i=x,y,z} \cos(q_i d) \right) + 2U n_c \varepsilon \bar{\varepsilon} + (\varepsilon \bar{\varepsilon})^2} \end{aligned} \quad (493)$$

エネルギースペクトル E_q は $q \rightarrow 0$, $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限でギャップレスになっていることが解る。この結果は HFBP 近似を行わず、非摂動ハミルトニアンを対角化して得られる結果と同じ形をしている。

謝辞

本研究を進めるにあたり、熱心に御指導して下さった山中由也教授に感謝いたします。山中先生には研究に対する視点や心構え等多くの事を学ばせていただきました。大場・中里研究室の奥村雅彦博士と峰真如博士には多くの実りある議論と助言を頂いたことに感謝します。須永知夏氏、榎本紘明氏、藤嶋浩史氏、今井亨氏にはゼミを通じて多くの議論をしていただきました。本論文を作成するにあたり、山中研究室の小川利昭氏、小田尚徹氏、齋藤英二氏には技術的な面での様々なサポートをしていただきました。また山中研究室の皆様とは卒修論等を通じ多くの議論をしていただいたことにより様々な分野への知見を広げることができました。この場を借りてお礼申し上げます。

参考文献

- [1] S. N. Bose, Z. Phys. **26**, 178 (1924).
- [2] A. Einstein, Sitzber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss. XVIII-XXV, 261 (1924); Sitzber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss. XXIII-XXV, 3 (1925).
- [3] N. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Science **269**, 198 (1995).
- [4] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Phys. Rev. Lett. **75**, 3669 (1995).
- [5] W. Ketterle, D. S. Durfee, and D. M. Stamper-Kurn. in *Bose-Einstein Condensation in Atomic Gases*, edited by M. Inguscio, S. Stringari, and C. E. Wieman, (IOS Press, Amsterdam, 1999).
- [6] S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, and W. Ketterle, Nature **392**, 151 (1998).
- [7] J. R. Abo-Shaeer *et al.*, Science **292**, 476 (2001).
- [8] L. Khaykovich *etal.*, Science **296**, 1290 (2002).
- [9] D. M. Stamper-Kurn, M. R. Andrews, A. P. Chikkatur, S. Inouye, H. -J. Miesner, J. Stenger, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett **80**, 2027 (1998).
- [10] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett **75**, 3969 (1995).
- [11] Y. Nambu and G. jona-Lasinio, Phys. Rev. **122**, 345 (1961).
J. Goldstone, Nuovo Cimento **19**, 154 (1962).

- J. Goldstone, A. Salam, and S. Weinberg, *Phys. Rev.* **127**, 965 (1962).
- [12] M. Greiner *et al.*, *Nature* **415**, 39 (2002).
- [13] M. B. Dahan, E. Peik, J. Reichel, Y. Castin, and C. Salomon, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4511 (1996).
- [14] E. P. Gross, *Nuovo Cimento* **20**, 454 (1961); *J. Math. Phys.* **4**, 195 (1963).
L. P. Pitaevskii, *Zh. Eksp. Teor. Fiz. [Sov. Phys. JETP]* **40**, 646 (1961); *Sov. Phys. JETP* **13**, 451 (1961).
- [15] E. Ezawa *et al.*, *Mathematical Physics and Stochastic Analysis — Essays of Honor of Ludvig Streit* — (World Scientific, Singapore, 1999), p. 169; H. Ezawa *et al.*, *Proc. of ISQM- Tokyo '01* (World Scientific, Singapore, in press).
- [16] A. L. Fetter, *Ann. Phys.* **70**, 67 (1972).
- [17] M. Okumura and Y. Yamanaka, *Phys. Rev. A* **68**, 13609 (2003).
- [18] M. Lewenstein and L. You, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3489 (1996).
- [19] H. Matsumoto and S. Sakamoto, *Prog. Theor. Phys.* **107**, 679 (2002).
- [20] B. Wu and Q. Niu, *Phys. Rev. A* **64**, 061603(R) (2001).
- [21] D. Jaksh, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3108 (1998).
- [22] A. M. Rey, K. Burnett, R. Roth, M. Edwards, C. J. Williams and C. W. Clark, *J. Phys. B* **36**, 825 (2003).
- [23] A. Trombettoni and A. Smerzi, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2353 (2002).
- [24] D. van Oosten, P. van der Straten, and H. T. Stoof *Phys. Rev. A*, **63** 053601 (2001).
- [25] 並木美喜雄, 大場一郎 共著, 散乱の量子力学 (岩波書店, 1997).
- [26] H. Umezawa, *Advanced Field Theory — Micro, Macro and Thermal Physics*, (AIP, New York, 1993).
- [27] 高橋康, 物性研究者のための場の量子論 (培風館, 1976).
- [28] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H. -J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Science* **275**, 637 (1997).
- [29] A. Röhlrl, M. Narashewski, A. Schenzle, and H. Wallis, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4143(1997).

- [30] D. S. Hall, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and H. A. Cornell, Phys. Rev. Lett. **81**, 1543 (1998).
- [31] Oliver Penrose and Lars Onsager, Phys. Rev. **104**, 576 (1956)
- [32] C. N. Yang, Rev. Mod. Phys. **34**, 4 (1962).
- [33] P. W. Anderson, Rev. Mod. Phys. **38**, 298 (1966).
- [34] Antony J. Leggett, Rev. Mod. Phys. **73**, 307 (2001).
- [35] J. C. Ward, Phys. Rev. **78**, 182 (1950).
- [36] T. Takahashi, Nuovo Cimento **6**, 370 (1957).
- [37] E. Taylor and E. Zaremba, Phys. Rev. A **68**, 053611 (2003).
- [38] M. Mine, M. Okumura and Y. Yamanaka, J. Math. Phys. **46**, 042307 (2005).
- [39] M. Okumura and Y. Yamanaka, Prog. Theor. Phys. **111**, 199 (2004).
- [40] Y. Kawaguchi and T. Ohmi, Phys. Rev. A **70**, 043610 (2004).
- [41] B. Wu and Q. Niu, New J. Phys. **5**, 104 (2003).
- [42] A. Smerzi, A. Trombettoni, P. G. Kevrekidis, and A. R. Bishop, Phys. Rev. Lett. **89**, 170402 (2002).
- [43] M. Mine, M. Okumura, T. Sunaga, Y. Yamanaka, preprint.
- [44] L. Fallani, L. De Sarlo, J. E. Lye, M. Modugno, R. Saers, C. Fort, and M. Inguscio, Phys. Rev. Lett. **93**, 140406 (2004).
- [45] V. N. Popov, *Functional Integrals and Collective Excitations* (Cambridge University Press, Cambridge, 1987)