

単一イオン異方性をもつ XY 模型を用いた 光格子中の強相関 Bose 原子気体が示す 集団励起の減衰の解析¹

京都大学基礎物理学研究所 長尾 一馬²

Mott 絶縁体転移の近傍にある光格子中の超流動 Bose 原子気体は、独立な集団励起モードとして、秩序変数の位相ゆらぎに対応した Nambu–Goldstone モードと、振幅ゆらぎに対応した Higgs モードをもつ。後者のモードは素粒子物理学における Higgs boson の類似物であり、その出現には超流動・絶縁体転移近傍における有効的な Lorentz 対称性の発現が関係している。本論文では、有限温度の 3 次元系におけるこれら二つの集団励起モードの減衰を研究する。減衰の性質を調べるために、Bose–Hubbard 模型の Mott 転移点近傍における有効模型である単一イオン異方性をもつ $S = 1$ XY 模型に対して場の理論の方法を適用し、それぞれのモードの減衰率を量子補正の最低次までの範囲で計算する。系の平均充填率は十分に大きな整数であると仮定する。解析の結果として、Higgs モードが、超流動・常流動転移温度以下の有限温度において、過減衰にならない程度の大きな減衰率を持つことを示す。また、Higgs モードの減衰率が温度の増加に対して単調に増加することを示す。さらに、Nambu–Goldstone モードが、超流動・常流動転移温度以下の有限温度において、過減衰になる程急峻に減衰するようなパラメータ領域を持つことを示す。減衰のこのような振る舞いに対して、エネルギー・運動量保存則の観点から物理的な描像を与える。

目次

1 導入	2
1.1 光格子中の冷却 Bose 原子気体	2
1.2 Mott 転移近傍における超流動体の素励起	3
1.3 冷却原子気体における Higgs モードの観測	4
1.4 Higgs モードとの結合が引き起こす Nambu–Goldstone モードの新奇な振る舞い	6
1.5 本論文の目的	6
1.6 本論文の構成	7

¹この原稿は、学位論文として京都大学に提出された修士論文に若干の加筆・修正を加えたものである。

²E-mail: kazuma.nagao@yukawa.kyoto-u.ac.jp

2	模型	7
2.1	Bose–Hubbard 模型	7
2.1.1	超流動・Mott 絶縁体転移	8
2.1.2	超流動体の素励起と臨界現象のユニバーサリティクラス	9
2.1.3	粒子・正孔対称性	11
2.2	Mott 転移点近傍における低エネルギー有効模型	12
2.2.1	Hilbert 空間の切断と Schwinger boson	12
2.2.2	有効スピン模型	14
3	手法	15
3.1	部分 Hilbert 空間における Gutzwiller 変分法	16
3.1.1	Bose 粒子系における Gutzwiller 変分法	16
3.1.2	Bose–Hubbard 模型の基底状態	18
3.1.3	Higgs モードと Nambu–Goldstone モード	20
3.2	正準変換	21
3.3	Holstein–Primakoff 展開 (スピン波理論)	24
3.4	Bogoliubov 変換	27
3.5	有限温度の場の量子論	29
3.5.1	Higgs モードの自己エネルギー	30
3.5.2	Nambu–Goldstone モードの自己エネルギー	34
4	Higgs モードの減衰率	35
4.1	長波長近似を用いた解析的な評価	36
4.2	数値的な評価	39
5	Nambu–Goldstone モードの減衰率	41
5.1	長波長近似を用いた解析的な評価	42
5.2	数値的な評価	46
6	まとめ	50
7	展望	51

1 導入

1.1 光格子中の冷却 Bose 原子気体

2002 年の超流動・Mott 絶縁体量子相転移の観測以来 [1]、光格子に閉じ込められた冷却 Bose 原子気体の系が注目を集めている [2]。この系は周期的な光格子を他の粒子と相互作用しながら運

動する Bose 粒子の集団であり、格子間の原子の遷移確率や原子間の相互作用の強さはレーザーの変調により高い精度で調整可能である。このような利点からこの系は制御性のよい強相関 Bose 粒子系の研究舞台を与え、ゆらぎ間の強い相関と Bose 統計性とは複雑に絡みあって生まれる非自明な物理現象の探索に用いられる。

光格子中の Bose 原子気体のような多体系の熱力学的・動力学的な性質を理解するための第一段階は、その系がもつ低エネルギーの素励起を理解することである。光格子中の Bose 原子気体は、基底状態として実現する状態に対応して、異なるタイプの素励起を励起スペクトルの低エネルギーセクターに持つ。例えば十分に深い超流動相 (いわば、弱相関の超流動状態) においては、自発的に破れた対称性の回復モードである Bogoliubov モード [3] (長波長領域では、Nambu–Goldstone モード [4, 5] と呼ばれる) が、一方で十分に深い Mott 絶縁相においては、平均充填率からのずれである粒子・正孔励起が低エネルギーの素励起として存在する。これらの素励起は実験的に観測されており [6, 7]、理論的な側面からも十分に理解されている。

1.2 Mott 転移近傍における超流動体の素励起

このような光格子中の Bose 原子気体の系が示す素励起に関する研究の一つの発展として、近年、Mott 絶縁体転移近傍における超流動 Bose 原子気体の素励起が注目を集めている [8, 9, 10]。Mott 転移近傍では粒子・正孔対称性由来した創発的な Lorentz 対称性の発現により [11]、十分に深い超流動状態のときには存在しなかった新しいタイプの低エネルギーの素励起が出現する。これを見るために超流動秩序とその励起状態の記述について簡単に復習しよう。光格子中の Bose 原子気体の系 (スピンなどの内部自由度を持たないとする) で実現する超流動状態は $U(1)$ 対称性の自発的に破れた秩序状態であり、それは一般に複素数の秩序変数で特徴付けられる。秩序変数は振幅と位相の自由度をもち、超流動相の上に立つ低エネルギーの素励起はこれらの自由度の微小な時間的・空間的変調に対応する (図 1 を参照)。位相の自由度の変調は集団的な密度ゆらぎに対応しており、連続対称性の破れに付随するギャップレスな Nambu–Goldstone モード (以下、NG モード) である [4, 5]。このタイプの素励起は Mott 転移点近傍ではもちろんのこと、Mott 転移点から離れたときにも低エネルギーの集団励起モードとして存在する。一方で、振幅の自由度の変調は凝縮体密度の変調に対応しており、転移点の直上を除けば有限のエネルギーギャップを持った集団励起モードである。このモードは素粒子物理学における Higgs boson [12] が従う古典的な運動方程式と同様の方程式に従うことから Higgs モードと呼ばれる [8, 13]。Higgs モードは Mott 転移点から十分に離れた超流動体中では高い励起エネルギーを持つ 1 粒子励起となっており、低エネルギー励起のみに着目する限りは出現しない。しかし、Mott 絶縁体になりかかった超流動体においては、転移点近傍における有効的な粒子・正孔対称性から秩序変数の従う運動方程式が相対論的な非線形 Klein–Gordon 方程式 (時間の 1 階微分項を持たず、代わりに時間の 2 階微分項を持つ) になるため、それは NG モードと直交する独立な低エネルギーの集団励起モードとして現れる (2.1 節も参照)。

Higgs モードの重要な特徴の一つはその普遍性である。Higgs モードは粒子・正孔対称性を持つ連続対称性を自発的に破った系で、特にその秩序変数のダイナミクスを定める有効理論が相対論

的な Ginzburg–Landau 型作用で与えられるような系において普遍的な集団励起モードとして存在する [8]。実際、冷却 Bose 原子気体の系のみならず、多くの凝縮系においてそれが存在する可能性が提案されている。例えばそのような系として、光格子中の冷却 Bose 原子気体 [9, 10]、超伝導体 (NbSe₂[14, 15, 16]、Nb_{1-x}Ti_xN[17, 18, 19, 20])、CDW 物質 (K_{0.3}MoO₃[21, 22]、TbTe₃[23, 24])、反強磁性体 (TiCuCl₃[25]、KCuCl₃[26])、そして超流動 ³He-B 相 [27, 28] などが挙げられる。

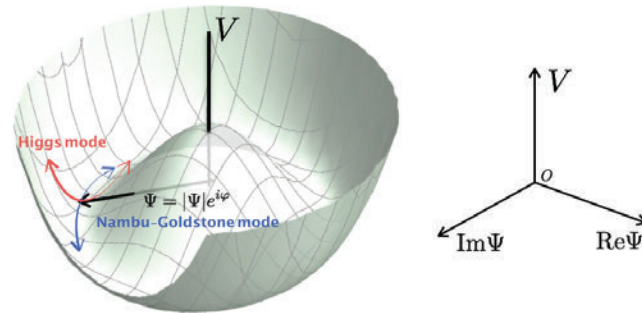


図 1: Higgs モードと Nambu–Goldstone モードの概念図。それぞれのモードは、秩序変数 $\Psi = |\Psi|e^{i\varphi}$ の振幅 $|\Psi|$ と位相 φ の変調に対応する。V は古典的なメキシカン・ハット型のポテンシャルである。

1.3 冷却原子気体における Higgs モードの観測

Higgs モードを冷却 Bose 原子気体の系において観測する試みがなされており、注目を集めている。ここでは代表的な実験として、Endres たちによる 2 次元系における光格子振幅の時間変調を用いた探索 [9]、および Bissbort たちによる 3 次元系における 2 光子 Bragg 散乱を用いた探索 [10] を簡単に紹介しよう。

Endres たちの実験 [9] では、2 次元の光格子系において顕微鏡を用いた Higgs モードの観測が試みられた。この実験では、原子の冷却に用いられるトラップの中心からある一定の領域にわたって、系の平均原子数密度がある整数 (文献 [9] では一サイト当たり一個) となるように超流動原子気体を用意し、光格子の振幅の外的な変調に対する系の温度上昇を顕微鏡を用いて観測することにより、Higgs モードの応答の立ち上がりを調べた (図 2 を参照)。観測された立ち上がりの周波数は Higgs モードの質量である Higgs ギャップの理論値と一致する。この結果は Higgs モードを完全に観測したと断定するには十分でないものの、Higgs モードの存在する可能性を示唆している。

Bissbort たちの実験 [10] では、3 次元の超流動 Bose 原子気体の系に対して、2 光子 Bragg 散乱分光法により Higgs モードの観測が試みられた。Gutzwiller 法による結果 [10] との比較から Higgs モードと解釈できるようなピークらしきものが実験結果に現れており、それは非線形応答による短波長領域の Higgs モードの励起に対応すると考えられているが [9]、その詳細の正確なところはあまりわかっていない。

このような現状から、理論研究の分野においては、Higgs モードが実験系において well-defined なピークとして観測可能かどうかに関心が集まっている。もし Higgs モードが well-defined なピーク

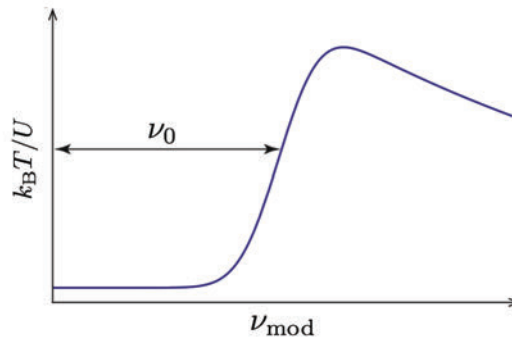


図 2: 実験 [9] において観測された Higgs モードの応答の立ち上がりの概形。横軸は、光格子の振幅に加えられる外的な変調の振動数 ν_{mod} であり、縦軸は、変調の結果としての系の温度上昇である。十分に小さい外的な変調振動数 ν_{mod} に対しては目立った温度上昇は観測されず、ある閾値以上の大きさになって初めて系の温度が大きく立ち上がる。温度上昇は系にエネルギーギャップのある励起状態が生成されたことを意味し、すなわち Higgs モードが励起されたことを示す。 $h\nu_0$ は Higgs ギャップの観測値である。ここで、 h は Planck 定数である。

クをスペクトル関数中に持たないならば、すなわち過減衰であるならば、Higgs モードは原理的に観測することができない。Higgs モードがどれほど不安定であるかを理論的に調べ、原理的に観測が可能かどうかを明らかにすることは、Higgs モードに対する実験系に結びついた理解を得るために必要である。

冷却原子系における Higgs モードの減衰の性質(減衰特性)は、Altman と Auerbach により先駆的に研究された [29]。彼らは絶対零度における Higgs モードの減衰振動の問題を摂動的な手法に基づいて解析した。その結論によれば、絶対零度における Higgs モードは、2次元系において過減衰であり、3次元系において少なくとも過減衰でない。これらの結論は他の類似する方法でも示すことができ、例えば2次元ではラージ N 展開の方法に基づいた研究 [30] がすでにあり、3次元においても摂動的繰り込み群の方法を用いれば示せると報告されている [31]。

摂動論による結論からは2次元系の Higgs モードは過減衰であることが帰結されるので、もしこれが正しいならば Higgs モードは2次元系において観測できないことになる。しかしながら、摂動的な手法は様々な近似を含んでおり、近似による人為的な要因が Higgs モードを過減衰にしている可能性がある。このような事情が一つの要因となって、これまでの Higgs モードの減衰の性質に関わる理論研究では、絶対零度の2次元系における Higgs モードの減衰特性に興味集中していた。特に、2次元系に対しては量子モンテカルロの方法 [32, 33, 34] や汎関数くりこみ群の方法 [35] といった強力な非摂動的数値計算手法が現実的に応用できるので、これらを用いた減衰特性の研究が行われてきた。数値解析の結果からは絶対零度の2次元系における Higgs モードが系のスペクトル関数中に well-defined なピークとして出現することが帰結される。この事実は、2次元系の Higgs モードが実は過減衰でないことを示している。また、これらの数値解析からの帰結は、Higgs モードが実験的に観測できる可能性を与えると同時に、Higgs モードの減衰現象の非摂動的な側面を示唆している。

以上で見たように、絶対零度における Higgs モードは、2次元系と3次元系において過減衰で

はない。しかしながら、現実の実験系が不可避的に有限温度であることから来る有限温度効果により、Higgs モードが過減衰になる可能性も考えられる。したがって、有限温度効果まで考慮した Higgs モード減衰特性の研究が次に必要とされることである。2次元系においては、量子モンテカルロ法を用いてこのような有限温度効果の記述がなされており、その結果によれば、超流動・常流動転移温度程度の有限温度であっても Higgs モードは well-defined なピークを持つことが確かめられている [32, 34]。一方で、3次元系に対しては、2次元系の解析において強力な手法であった量子モンテカルロ法を適用することが実際上困難であるので、その有限温度効果に関しては未だに非自明な問題として残っている。このような現状から、有限温度の3次元系における Higgs モードの減衰現象に対して、標準的な近似法に基づいた有限温度効果を記述する理論が必要である。

1.4 Higgs モードとの結合が引き起こす Nambu–Goldstone モードの新奇な振る舞い

Higgs モードに関するこれまでの研究では、その観測可能性や臨界性のような Higgs モードそれ自身の静的・動的性質が注目されてきた。その一方で、近年、もう一つの独立な励起モードである NG モードの性質に、Higgs モードの存在に由来した特徴的な振る舞いが現れることが注目を集めつつある。一般に、系が低エネルギーの集団励起モードの一つとして Higgs モードを持つとき、NG モードは、NG モードそれ自身だけでなく、Higgs モードとも相互作用する [30]。このような Higgs–NG 相互作用は、NG モードの振る舞いを著しく変化させ、興味深い動的な現象を引き起こす。例えば、局所的に束縛された Higgs モードがそこへ入射してくる NG モードと相互作用することによって、NG モードの遷移振幅に Fano 共鳴現象が現れることが理論的に示されている [36]。この種の多体現象はあまり例が知られていないことから、更なる理論研究を行うことで Higgs モードに起因した新しい NG モードの振る舞いが見出されることが期待される。

1.5 本論文の目的

以上で述べたことをまとめると、まず3次元系における Higgs モードの減衰特性に対する有限温度効果の記述が必要とされている。また、最近の理論研究から、NG モードの性質にも Higgs モードとの相互作用に由来する興味深い現象が起きることが知られているので、更なる研究により新しい例が見出されることが期待されている。このような現状をふまえて、本論文では、3次元光格子中の Bose 原子気体の系における Higgs モードと NG モードの減衰を、特にその有限温度効果に着目して研究する。この目的のために、Higgs モードと NG モードの減衰率を有限温度において計算し、その Mott 絶縁体転移点近傍における振る舞いを理解する。解析手法としては、光格子中の Bose 原子気体を記述する Bose–Hubbard 模型の、Mott 転移点近傍における有効模型である単一イオン異方性を持った $S = 1XY$ 模型に基づいた解析 [29] を用いる。この手法では平均場の上に見えるスピン波励起に関する Holstein–Primakoff 展開を用いるが、本論文では有限温度の3次元系に着目するので、この手法は正当性を失わない。有効模型に対して有限温度の場の理論の方法を適用し、1-loop(2次摂動)の範囲内で各モードの自己エネルギーを計算することで各モードの減衰率を

求める。得られた減衰率に対する表式に対して、長波長近似に基づいた解析的な積分評価と数値的な積分評価を行うことで、転移点近傍の減衰の性質を議論する。

1.6 本論文の構成

本論文は以下のように構成される。第2章では、第3章以降の議論の準備として、光格子中の Bose 原子気体の系を記述する Bose–Hubbard 模型、およびその Mott 転移近傍における有効模型を導入する。第3章では、集団励起モードの減衰を解析する手法を解説する。第4章では、第3章で導いた減衰率の場の理論的表式を用いて、有限温度における Higgs モードの減衰を議論する。第5章では、第4章と同様に、第3章で導いた減衰率の場の理論的表式を用いて、有限温度における NG モードの減衰を議論する。第6章では、全体のまとめが与えられる。第7章では、本研究の今後の展望について述べる。

2 模型

この章では、光格子中の Bose 原子気体を記述する模型を導入する。2.1 節では、系を強束縛近似の範囲でよく記述する Bose–Hubbard 模型について紹介する。それが示す顕著な性質のうち、特に本研究と関わりのある超流動・Mott 絶縁体量子相転移、超流動体の素励起と転移のユニバーサルリティクラス、そして整数充填率の系が Mott 絶縁体転移の兆候を示すときに現れる粒子・正孔対称性について最小限の解説を行う。2.2 節では、Mott 絶縁体転移近傍における超流動の性質を有効的に記述する単一イオン異方性を持つ $S = 1XY$ 模型を導出する。この有効模型は Bose–Hubbard 模型がもつ高エネルギーのゆらぎの自由度を無視することで導かれるが、それを系統的に行うための手法として Schwinger boson の方法を用いる。

2.1 Bose–Hubbard 模型

本論文では、3次元光格子中の Bose 原子気体の系を研究する。系を構成する原子気体はスピンなどの内部自由度を持たないとし、光格子の形状は立方格子であるとする。

光格子が強束縛近似が妥当である程度の十分な深さを持つとき、Bose 原子気体の振る舞いはいわゆる Bose–Hubbard 模型

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + \text{h.c.}) + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \mu \sum_i n_i \quad (1)$$

で記述される [2, 37]。ここで、 a_i (a_i^\dagger) はサイト i において Bose 原子を消滅 (生成) する演算子であり、 $n_i = a_i^\dagger a_i$ はサイト i における粒子数の演算子である。記号 $\langle i, j \rangle$ は隣接するサイトの組を表す。右辺の各項を特徴付ける J 、 U 、そして μ は、それぞれ隣り合うサイト間の原子の遷移振幅、単一サイトを複数の原子が占有したときに働くオンサイト相互作用エネルギー、そして化学ポテンシャルである。この模型は、元々電子系における金属・絶縁体転移のアナロジーとしての超流動・絶

縁体転移の臨界性を研究する目的で考案された [37]。冷却原子気体の系で実現される以前は、多孔質媒質中の ^4He や Josephson 接合した粉体超伝導などの固体系が現実の対応物であった。冷却原子系での実現は 1998 年に Jaksch らによって提案された [38]。

光格子系では、光格子の深さの調整、および磁氣的・光学的 Feshbach 共鳴を利用した原子の散乱長の調整 [39] により、パラメータ J と U を高い精度で実験的に制御することができる。パラメータが光格子の深さや散乱長にどのように依存するか見てみるために、3次元立方格子の場合に準古典理論の範囲内で計算された表式を引用しよう [2]。それは

$$\frac{J}{E_R} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} s^{\frac{3}{4}} \exp(-2\sqrt{s}), \quad (2)$$

$$\frac{U}{E_R} = \frac{8}{\pi} \frac{a_s}{a} A_I^3(s)^{3B_I} \quad (3)$$

で与えられる。ここで、 E_R は反跳エネルギー、 a_s は s 波の散乱長、 $(A_I, B_I) = (\sqrt{\pi/2}, 1/4)$ は定数、 a は格子間隔、 $s = V_0/E_R$ は光格子の深さ、 V_0 は光格子を作る周期ポテンシャルの強さである。表式から明らかなように、 U は光格子の深さ s に対してべき関数的な振る舞いを示し、一方で J は指数関数的な振る舞いを示す。よって光格子の深さを調整することで U/J の絶対値を、オンサイト相互作用項が支配的な領域 ($|U/J| \gg 1$) からトンネリング項が支配的な領域 ($|U/J| \ll 1$) まで調整することができる。さらに U の表式が散乱長 a_s を含むことから、これを Feshbach 共鳴を利用してその符号と強さを調整することができる。このような自由度は光格子系に特有のものであり、光格子系を記述するモデルとしての Bose-Hubbard 模型は広いパラメータ領域を持つことがわかる。

2.1.1 超流動・Mott 絶縁体転移

Bose-Hubbard 模型が示す特徴的な性質の一つは、充填率が整数であるときに絶対零度において起こる超流動・Mott 絶縁体量子相転移である。 $U/(zJ)$ (z は配位数) が十分に小さいとき、各サイトにおいて粒子数は確定せず、系は超流動状態にある。この状態は粒子が格子全体にわたって遍歴する状態を表す。次に、徐々に $U/(zJ)$ を大きくし、ある閾値 (相境界) を越えたとすると、粒子が動き回るよりもそれぞれのサイトにとどまった方がエネルギー的に得であるような状態となる。このとき、系の各サイトにおいて局所的な粒子数は確定しており、各サイトに原子が局在している状態である。このような系に対する密度ゆらぎの生成には有限エネルギーが必要であり、任意に小さいエネルギーで密度ゆらぎを生成できないという意味で系は非圧縮である。したがって、系は超流動状態から絶縁体状態へと相転移したことがわかる。このように、粒子間に働く相関により粒子がそれぞれのサイトに局在し、系が絶縁化している状態を Mott 絶縁体状態と呼ぶ。このような量子相転移は、光格子中の Bose 原子気体の系において実験的に観測されている [1]。

Bose-Hubbard 模型の絶対零度における相図を概念的に示したのが図 3 である。超流動・Mott 絶縁体転移に対応する相境界は、図 3 に示したように、山の形状をした Mott 相が超流動相の上に並んだような構造をしている。それぞれの山のちょうど頂点 (Mott 頂点と呼ぶ) から横軸に水平方向に

わたって、系の平均粒子数密度は整数となる。この相境界は、近似的な手法ではサイト分断平均場近似法 [40] や Gutzwiller 変分法 [41] により、厳密な数値計算手法では 3 次元系と 2 次元系に対する量子モンテカルロ法 [42, 43] や 1 次元系に対する密度行列繰り込み群法 (DMRG)[44, 45] により求めることができる。相転移の種類は、整数充填率の 1 次元系が示す Berezinskii–Kosterlitz–Thouless 転移 [46] を例外とすれば、2 次転移である。

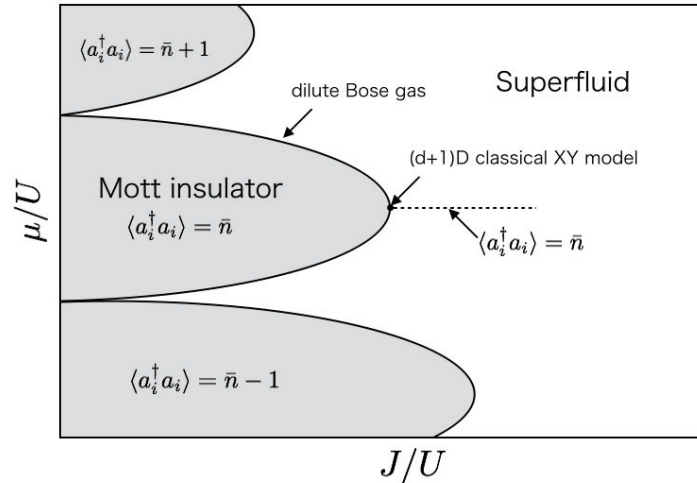


図 3: 絶対零度における Bose-Hubbard 模型の相図の概念図。縦軸は化学ポテンシャルであり、横軸はトンネリング変数である。ここではそれぞれオンサイト相互作用でスケールされている。 \bar{n} はある整数である。

2.1.2 超流動体の素励起と臨界現象のユニバーサリティクラス

本論文では超流動相における集団励起が主要な興味の対象である。以下では、超流動相における素励起を Mott 転移の相境界から十分に遠い領域と十分に近い領域の二つに分けて考察しよう。

相境界から十分にはなれた所の超流動状態、すなわち弱相関の超流動状態はよく知られた Gross–Pitaevskii 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{x}, t) = \left\{ -\frac{\nabla^2}{2m} + V(\mathbf{x}, t) + g|\Phi(\mathbf{x}, t)|^2 \right\} \Phi(\mathbf{x}, t) \quad (4)$$

で記述される [47, 48]。ここで、 $\Phi(\mathbf{x}, t)$ は凝縮体波動関数、 $V(\mathbf{x}, t)$ は外場のポテンシャル、そして g は 2 粒子間の相互作用を特徴付ける結合定数である。以下では $\hbar = 1$ であるとする。この方程式を線形化して得られる素励起のスペクトルは

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}} + 2gn)}, \quad \epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}^2}{2m} \quad (5)$$

であり、ギャップレスである。 n は平均粒子数密度である。この分散関係をもつ素励起は長波長領域では音波のように振る舞うが、短波長領域ではあたかも自由粒子のように振る舞う。このような分散関係を持つ素励起は Bogoliubov 励起と呼ばれる。この Bogoliubov 型スペクトルは、Bose–Hubbard 模型 (1) に対して Bogoliubov 近似を施すことによっても導出できる [40]。

Gross–Pitaevskii 方程式や Bogoliubov 近似は Mott 絶縁相への相転移を予言しないので、相境界近傍の強相関領域にある超流動の性質は別の方法で記述する必要がある。超流動相から Mott 絶縁相への相転移が 2 次転移であることから、その相境界近傍の超流動の振る舞いは次の Ginzburg–Landau 型の有効作用で記述される [11]。

$$\mathcal{S}_{\text{GL}} = \int_0^{1/T} d\tau \int d^D x \left\{ K_1 \Psi^*(\mathbf{x}, \tau) \partial_\tau \Psi(\mathbf{x}, \tau) + K_2 |\partial_\tau \Psi(\mathbf{x}, \tau)|^2 + K_3 |\nabla \Psi(\mathbf{x}, \tau)|^2 - r |\Psi(\mathbf{x}, \tau)|^2 + \frac{u}{2} |\Psi(\mathbf{x}, \tau)|^4 \right\} \quad (6)$$

ここで、 τ は虚時間方向への自由度を表す変数であり、 $\Psi(\mathbf{x}, \tau)$ は超流動秩序変数である。Boltzmann 定数 k_B は 1 であるとした。 K_1 と K_2 はそれぞれ時間の 1 階微分項と 2 階微分項を特徴付ける。そして、 K_3 は運動項を、 r は質量項を、 u は有効作用の非線形性を特徴付ける。超流動相と Mott 絶縁相の間の相境界は $r \equiv 0$ の条件から定められる。ここで K_1 が

$$K_1 = \frac{\partial r}{\partial \mu} \quad (7)$$

で与えられることに注意しておこう。

Mott 頂点を除いた Mott 領域の上側の境界と下側の境界では、相境界の形から明らかに $K_1 \neq 0$ であり、そのときの有効作用は Galilei 対称性を持っている。したがって、相転移の前兆として起きる臨界現象の動的臨界指数は $z = 2$ である。また、種々の臨界指数の計算をすればわかるように、その相転移のユニバーサリティ・クラスは希薄 Bose 気体転移に分類される [49]。有効作用を線形化することで素励起の分散関係を導くと、それは Bogoliubov 型のスペクトル (5) と同じ形を持つ。

その一方で、Mott 頂点においては $K_1 = 0$ であり、有効作用の対称性が Galilei 対称性から Lorentz 対称性に持ち上がるため、 $K_1 \neq 0$ のときとは本質的に異なる振る舞いを示す。実際、 $K_1 = 0$ としたときの有効作用 (6) は

$$\mathcal{S}_{\text{GL}} = \int_0^{1/T} d\tau \int d^D x \left\{ K_2 |\partial_\tau \Psi(\mathbf{x}, \tau)|^2 + K_3 |\nabla \Psi(\mathbf{x}, \tau)|^2 - r |\Psi(\mathbf{x}, \tau)|^2 + \frac{u}{2} |\Psi(\mathbf{x}, \tau)|^4 \right\} \quad (8)$$

という形を持つ。この有効作用は明らかに Lorentz 対称性をもっており、したがって動的臨界指数は $z = 1$ となる。そして、その相転移のユニバーサリティ・クラスは、 $(d + 1)$ 次元古典 XY 模型と同じである [37]。有効作用を変分することで得られる鞍点の方程式は非線形 Klein-Gordon 方程式である。

$$K_2 \partial_\tau^2 \Psi(\mathbf{x}, \tau) - r \Psi(\mathbf{x}, \tau) + u |\Psi(\mathbf{x}, \tau)|^2 \Psi(\mathbf{x}, \tau) = 0 \quad (9)$$

この方程式を、 $(\tau \rightarrow it$ と解析接続し、解として平面波解を考えたとして) 場の定常解 $\Psi_0(\mathbf{x}, t)$ まわりの微小なゆらぎ $\Psi(\mathbf{x}, t) - \Psi_0(\mathbf{x}, t) = \mathcal{U} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - i\omega t} - \mathcal{V} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} + i\omega t}$ について線形化すると、二つのデカップルした固有振動モード $(f_p, f_a) = (\mathcal{U} + \mathcal{V}, \mathcal{U} - \mathcal{V})$ の存在がわかる。その固有エネルギーは

$$E_p = \sqrt{\frac{K_3}{K_2}} |\mathbf{k}|, \quad E_a = \sqrt{\Delta_a^2 + \frac{K_3}{K_2} |\mathbf{k}|^2}, \quad \Delta_a = \sqrt{\frac{2r}{K_2}} \quad (10)$$

で与えられる。この表式からわかるように、固有モード f_a は Δ_a だけのエネルギー・ギャップを持つ。このようなギャップの開いた固有振動モードは、簡単な計算から秩序変数の振幅自由度のゆらぎに対応していることがわかり、Higgs 振幅モードと呼ばれる。一方で、ギャップレスな固有モード f_p は、秩序変数の位相自由度のゆらぎに対応したモードであり、Nambu–Goldstone(NG) 位相モードと呼ばれる。このモードは長波長領域の Bogoliubov モードと同じ形の分散関係を持つ。このように $K_1 = 0$ の場合は、系は低エネルギーの集団励起モードとしてギャップフルな Higgs モードを持つので、その点で $K_1 \neq 0$ の場合と本質的に異なる。

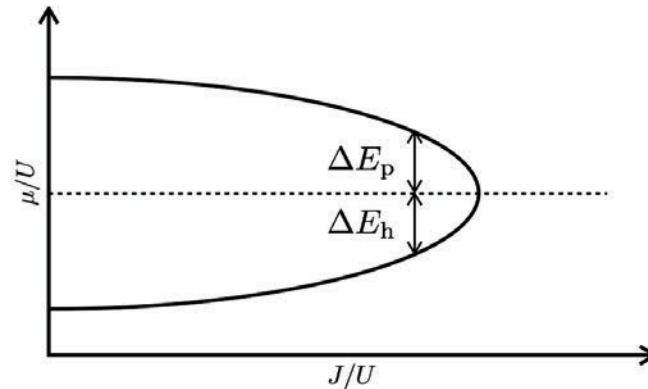


図 4: 基底状態の相図から読み取れる粒子励起と正孔励起のエネルギー。点線はちょうど Mott 頂点を通る。頂点近傍では相境界が二次関数のようになることから、これら二つのエネルギーは同じになる。つまり、粒子・正孔対称性が発現する。

2.1.3 粒子・正孔対称性

Higgs モードの出現は、 $K_1 = 0$ を満たす Mott 頂点が粒子・正孔対称性を持っていることに起源を持つ。Mott 頂点が粒子・正孔対称性を持つ理由を理解するため、ここで Mott 絶縁相における素励起を考えよう。Mott 絶縁相における素励起は、有限のエネルギー・ギャップを持った 1 粒子励起と 1 正孔励起の 2 種類である。Mott 頂点から水平方向に直線を引いたとして、その直線から上側の相境界までの距離は 1 粒子励起エネルギー ΔE_p に等しく、他方下側の相境界までの距離は 1 正孔励起エネルギー ΔE_h に等しい(図 4 参照)。Mott 頂点に近い所では、相境界が頂点を中心として二次関数的な形状を持ち、したがってこの点の近傍では $\Delta E_p = \Delta E_h$ である。このとき、粒子と正孔の入れ替えに対して系のエネルギーは変化しないので、系は粒子・正孔対称性を持つ。図 4 の点線に沿って系を超流動相へ近づけていくと、 $\Delta E_p = \Delta E_h$ を満たしながらそれぞれのギャップが徐々に閉じていき、ちょうど Mott 頂点において両方のギャップが閉じる。Mott 頂点近傍の超流動相において、ギャップレスになった粒子励起と正孔励起が対称的あるいは反対称的に結合することで、それぞれ Higgs モードと NG モードになるのである。もし仮に $\Delta E_p = \Delta E_h$ が満たされないように Mott 絶縁相から超流動相へ相転移させたとしても、そのときにはいずれか一方のギャップのみが閉じているので、結果として一つのギャップレスな NG モードしか出現しないのである。このように、Higgs モードの出現には粒子・正孔対称性が重要であることがわかる。今の場合、粒子・

正孔対称性は $K_1 = 0$ と等価であり、有効作用が素励起として NG モードとデカップルした Higgs モードを持つ条件と一致する。

以上の議論をまとめよう。Mott 頂点における粒子・正孔対称性が起源となって、系の低エネルギーの集団励起モードとして、ギャップレスな NG モードに加えて、ギャップフルな Higgs モードが出現することがわかった。次に、Mott 転移点近傍における低エネルギーの物理を記述する Bose–Hubbard 模型の低エネルギー有効模型の議論に移ろう。

2.2 Mott 転移点近傍における低エネルギー有効模型

本節では、充填率が \bar{n} の Mott 頂点の近傍に着目し、その領域の低エネルギーの物理を記述する有効模型を導く。有効模型の導出は、Bose–Hubbard 模型で記述される系の Hilbert 空間から高エネルギーのゆらぎの自由度を無視することで行われる。この方法は Altman と Auerbach により発展され、臨界点近傍における秩序変数の緩和ダイナミクスの研究に用いられた [29]。この有効模型が本研究で行われる解析の出発点となる。

導出に取りかかる前に、2.1 節で導入した Bose–Hubbard 模型 (1) の化学ポテンシャルの原点を \bar{n} 番目の Mott 頂点の位置から測るように再定義する。これは、化学ポテンシャルを単に $\mu + U(1/2 - \bar{n}) \rightarrow \delta\mu$ と定義し直すことで行われる。Bose–Hubbard 模型は、重要でない定数項は無視して、

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + \text{h.c.}) + \frac{U}{2} \sum_i (n_i - \bar{n})^2 - \delta\mu \sum_i (n_i - \bar{n}) \quad (11)$$

という形に書き直される。 $\delta\mu$ は Mott 頂点の位置に対応した値から測ったときの化学ポテンシャルである。第 2 項と第 3 項の形を見ればわかるように、これらは偏差 $\Delta n_i = n_i - \bar{n}$ を用いて書き表されているので、局所的な粒子励起 ($\Delta n_i = 1$) と正孔励起 ($\Delta n_i = -1$) とを見かけ上同等に扱うことができる。以下の議論からわかるように、この表式は粒子・正孔対称性のある場合の議論に適している。

2.2.1 Hilbert 空間の切断と Schwinger boson

低エネルギー有効模型は、Bose–Hubbard 模型 (11) のある低エネルギー部分空間への射影により与えられる。充填率が \bar{n} に等しい Mott 相への相転移点近傍では、模型 (11) のオンサイト相互作用項の働きにより各サイト i における占有数 n_i の \bar{n} からのゆらぎは十分に小さいと見なせる。これは Mott 転移点近傍では $U/(zJ)$ が十分に大きいことから大きな粒子数ゆらぎはエネルギー的に損だからである。したがって、完全な Hilbert 空間 $\mathcal{H} = \prod_i \{|n\rangle_i | n \in \mathbf{N} \cup \{0\}\}$ に属するすべての状態のうち、平均粒子数に等しい充填率を持つ状態 $|\bar{n}\rangle_i$ と、そこからの局所的な粒子励起状態 $|\bar{n} + 1\rangle_i$ 、そして正孔励起状態 $|\bar{n} - 1\rangle_i$ のみが重要であり、それ以外の状態は無視できる。つまり、転移点近傍の系の低エネルギーの性質は、部分 Hilbert 空間 $\mathcal{H}' = \prod_i \{|\bar{n} + 1\rangle_i, |\bar{n}\rangle_i, |\bar{n} - 1\rangle_i\}$ により近似的に記述される。Bose–Hubbard 模型をこの部分空間に射影して得られる有効模型は、Mott 転移点近傍における系の低エネルギーの振る舞いを有効的に記述する。

Hilbert 空間を低エネルギー部分空間で近似することは、Bose–Hubbard 模型が元々持っている高次のゆらぎの自由度を無視することに対応する。これを系統的に行うために、完全な Hilbert 空間 (およびその双対空間) の各元に対して次の拘束条件付きの Bose 演算子

$$|\bar{n} + m\rangle_i = t_{mi}^\dagger |\text{vac}\rangle, \quad {}_i\langle \bar{n} + m| = \langle \text{vac}| t_{mi} \quad \text{for } m = -\bar{n}, -(\bar{n} - 1), -(\bar{n} - 2), \dots \quad (12)$$

を導入する。ここで、演算子 t_{mi}^\dagger と t_{mi} は交換関係

$$[t_{mi}, t_{nj}^\dagger] = \delta_{m,n} \delta_{i,j}, \quad [t_{mi}, t_{nj}] = [t_{mi}^\dagger, t_{nj}^\dagger] = 0 \quad (13)$$

を満たし、さらに局所的な拘束条件

$$\sum_m t_{mi}^\dagger t_{mi} = 1 \quad (14)$$

が課されているものとする。後者の条件は、例えば $t_{1i}^\dagger t_{0i}^\dagger |\text{vac}\rangle$ のような状態を除去するために必要である。右辺の 1 は Hilbert 空間の次元数に等しい単位行列であり、完全な Hilbert 空間に対しては無限次元行列である。 $|\text{vac}\rangle$ はこれらの Bose 演算子の真空であり、 $t_{mi} |\text{vac}\rangle = 0 (m = -\bar{n}, -\bar{n} + 1, \dots)$ を満たす。 t_{0i}^\dagger は平均粒子数 \bar{n} に等しい占有数を持つ状態をサイト i に生成する演算子であり、 $t_{m(>0)i}^\dagger$ はサイト i における粒子励起を、そして $t_{m'(<0)i}^\dagger$ はサイト i における正孔励起を生成する演算子である。(12) 式のような拘束条件付きの多成分 boson は Schwinger boson[50]、あるいは Flavor boson[51, 52] と呼ばれる。(12) 式を用いて演算子 a_i^\dagger と n_i の Schwinger boson 表示を求めることができ、それは

$$a_i^\dagger = \sum_{m=-\bar{n}}^{\infty} \sqrt{\bar{n} + m + 1} t_{m+1i}^\dagger t_{mi}, \quad (15)$$

$$n_i = \sum_{m=-\bar{n}}^{\infty} (\bar{n} + m) t_{mi}^\dagger t_{mi} \quad (16)$$

のような bi-linear な形で与えられる。この表式から模型 (11) の Schwinger boson 表示を求められる。それは $t_{mi}^\dagger, t_{mi} (m = \pm 2, \pm 3, \dots)$ のような高次のゆらぎの自由度を含んでいる。

先に述べた Hilbert 空間の近似は、Schwinger boson 表示においては、高次のゆらぎ $t_{mi}^\dagger, t_{mi} (m = \pm 2, \pm 3, \dots)$ を無視し、次の 3 種類の Schwinger boson

$$|\bar{n} + 1\rangle_i = t_{1i}^\dagger |\text{vac}\rangle, \quad |\bar{n}\rangle_i = t_{0i}^\dagger |\text{vac}\rangle, \quad |\bar{n} - 1\rangle_i = t_{-1i}^\dagger |\text{vac}\rangle, \quad (17)$$

のみを残す操作に読み替えられる。ここで、高次のゆらぎを無視したことに伴い拘束条件 (14) が

$$t_{1i}^\dagger t_{1i} + t_{0i}^\dagger t_{0i} + t_{-1i}^\dagger t_{-1i} = 1, \quad (18)$$

となることに注意しよう。これは Hilbert 空間が低エネルギーセクターに制限されていることを意味している。この近似の範囲で (15) と (16) は

$$a_i^\dagger \approx \sqrt{\bar{n} + 1} t_{1i}^\dagger t_{0i} + \sqrt{\bar{n}} t_{0i}^\dagger t_{-1i}, \quad (19)$$

$$n_i \approx t_{1i}^\dagger t_{1i} + t_{-1i}^\dagger t_{-1i} + \bar{n} \quad (20)$$

となる。元々の演算子が Hilbert 空間のサイズを反映して無限次元行列であったのに対して、この演算子は部分 Hilbert 空間に関するものなので 3×3 行列である。この表式を模型 (11) に代入することで低エネルギー有効模型を求めることができる。

2.2.2 有効スピン模型

充填率 \bar{n} が十分に大きな整数であるとき、有効模型は非常に簡単な形をとる。以下では充填率が高い場合に話を限定して議論を進めよう。このとき、(19) 式は

$$a_i^\dagger \approx \sqrt{\bar{n}}(t_{1i}^\dagger t_{0i} + t_{0i}^\dagger t_{-1i}), \quad \text{for } \bar{n} \gg 1 \quad (21)$$

と書くことができる。(21) 式と (20) 式を模型 (11) に代入することで、有効模型

$$H_{\text{eff}} = -\frac{J\bar{n}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + \frac{U}{2} \sum_i (S_i^z)^2 - h \sum_i S_i^z \quad (22)$$

を得る。ここで形式的な理由で化学ポテンシャルを $h \equiv \delta\mu$ と書き直した。新しく導入された演算子 S_i^+ 、 S_i^- 、 S_i^z は、それぞれ Schwinger boson を用いて、

$$S_i^+ = \sqrt{2}(t_{1i}^\dagger t_{0i} + t_{0i}^\dagger t_{-1i}), \quad S_i^- = \sqrt{2}(t_{0i}^\dagger t_{1i} + t_{-1i}^\dagger t_{0i}), \quad S_i^z = t_{1i}^\dagger t_{1i} - t_{-1i}^\dagger t_{-1i} \quad (23)$$

で定義される。これらの演算子は、もし状態 $|\bar{n} + m\rangle$ を状態 $|S = 1, S^z = m\rangle$ と見なすならば、スピンの大きさ $S = 1$ を持つスピン演算子と見なせる。簡単な計算により、演算子 (23) が SU(2) 代数を成すことを確かめることができる。

$$\begin{aligned} [S_i^+, S_j^-] &= [\sqrt{2}(t_{1i}^\dagger t_{0i} + t_{0i}^\dagger t_{-1i}), \sqrt{2}(t_{0j}^\dagger t_{1j} + t_{-1j}^\dagger t_{0j})] \\ &= 2\{[t_{1i}^\dagger t_{0i}, t_{0j}^\dagger t_{1j}] + [t_{0i}^\dagger t_{-1i}, t_{-1j}^\dagger t_{0j}]\} \\ &= 2\{t_{1i}^\dagger [t_{0i}, t_{0j}^\dagger] t_{1j} - t_{0j}^\dagger [t_{1j}, t_{1i}^\dagger] t_{0i} + t_{0i}^\dagger [t_{-1i}, t_{-1j}^\dagger] t_{0j} - t_{-1j}^\dagger [t_{0j}, t_{0i}^\dagger] t_{-1i}\} \\ &= 2(t_{1i}^\dagger t_{1i} - t_{-1i}^\dagger t_{-1i})\delta_{i,j} \\ &= 2S_i^z \delta_{i,j} \end{aligned}$$

である。また、 S_i^2 が SU(2) 代数の Casimir 演算子であることも簡単に確かめることができる。

$$\begin{aligned} S_i^2 &= (S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 + (S_i^z)^2 \\ &= (t_{1i}^\dagger t_{0i} t_{0i}^\dagger t_{1i} + t_{0i}^\dagger t_{-1i} t_{-1i}^\dagger t_{0i} + t_{0i}^\dagger t_{1i} t_{1i}^\dagger t_{0i} + t_{-1i}^\dagger t_{0i} t_{0i}^\dagger t_{-1i}) + (t_{1i}^\dagger t_{1i} - t_{-1i}^\dagger t_{-1i})^2 \\ &= 2(t_{1i}^\dagger t_{1i} + t_{0i}^\dagger t_{0i} + t_{-1i}^\dagger t_{-1i}) \\ &= 1 \cdot (1 + 1). \end{aligned}$$

ここで上から 3 番目の等号では $(t_{mi}^\dagger t_{mi})^2 = t_{mi}^\dagger t_{mi} (m = 0, 1, -1)$ と $t_{mi}^\dagger t_{mi} t_{ni}^\dagger t_{ni} = 0 (m \neq n)$ を、そして最後の等号では拘束条件 $\sum_{m=-1}^{m=1} t_{mi}^\dagger t_{mi} = 1$ を用いた。結局、演算子 (23) は SU(2) 代数のスピン 1 表現の Schwinger boson 表示であることがわかり、Bose–Hubbard 模型が (22) 式のような形を持つスピン系の模型に射影されることがわかった。

スピン模型 (22) と Bose–Hubbard 模型 (11) を構成するそれぞれの項の対応関係を説明しよう。右辺第 1 項は模型 (11) のおけるトンネリング項に対応しており、局在スピン系におけるスピン 1 の XY 模型そのものである。もし $J\bar{n}/U \gg 1$ であるならば、この模型は基底状態として XY 面内のあ

る方向にスピンの向きがそろった XY 強磁性状態を形成する。この状態は明らかに $O(2) \approx U(1)$ 対称性を破っている。

右辺第2項はオンサイト相互作用項に対応しており、単一イオン異方性 (uniaxial single-ion anisotropy) 項と呼ばれる。もしスピンの大きさが $S = 1/2$ であるならば、この項は単なる定数であり重要ではない。この事実は、 $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ のそれぞれに状態への作用に対して、この項が同じ固有値を与えることから理解される。すなわち、スピンの可能な配向に対して一定である。一方で、スピンの大きさが $S = 1$ の場合、 $|S = 1, S^z = 0\rangle$ の場合と $|S = 1, S^z = \pm 1\rangle$ の場合とで与える固有値の値が異なる。実際、前者は最低固有値を持ち、後者はそれに対して U 程度大きな固有値を持つ。このように異方性項はスピンの可能な配向に対して定数ではなく、 z 成分が 0 以外の値を持つことがエネルギー的に損になるようにスピンの配向に対して確率的な重みを与える。もし $J\bar{n}/U \ll 1$ であるならば、その基底状態は $\prod_i |S = 1, S_i^z = 0\rangle$ である。 z 軸周りの回転を生成する生成子を演算するとわかるように、この状態は $O(2) \approx U(1)$ 対称性を持つ。これは XY 面内のあらゆる向きを無秩序に配向している状態であると理解できる。

右辺第3項は化学ポテンシャル項に対応する外部磁場とスピンの z 成分との結合項である。整数充填率であることは、 $h = 0$ に対応する。すなわち外場が存在しないとき、このモデルは粒子・正孔対称性を持つ。

最後に、外場がないときの有効スピンモデル (22) が粒子・正孔対称性を持つことを実際に確認しておこう。粒子・正孔対称性とは t_{1i} と t_{-1i} の交換に対してモデルが不変であることを意味する。この性質は Mott 転移点近傍において系が有効的に粒子・正孔対称性を持つことを反映している。有効スピンモデルに対して変換 $C: t_{1i} \Leftrightarrow t_{-1i}$ を施してみよう。この変換に対して、スピン演算子 (23) は

$$C: \begin{cases} S_i^+ \rightarrow S_i^- \\ S_i^- \rightarrow S_i^+ \\ S_i^z \rightarrow -S_i^z \end{cases} \quad (24)$$

のように変換される。明らかに、このような変換 C に対して XY 項と単一イオン異方性項は不変であり、磁場 h との相互作用項は符号を変えることがわかる。したがって、 $h = 0$ のとき、有効モデル H_{eff} は変換 C に対して不変である：

$$[H_{\text{eff}}, C] = 0 \quad (25)$$

このような粒子・正孔対称性のため、このモデルから非線形シグマモデルの方法で導いた有効的な場の理論 (格子モデルの連続極限) は相対論的な Ginzburg-Landau 型の作用を持つ ((8) 式を見よ)[29]。

3 手法

第2章では、Mott 絶縁体転移近傍における系の振る舞いを記述する有効モデル (22) を導いた。この章では、有効モデル (22) から出発して Higgs モードと NG モードの減衰を解析するための手法を説明する。3.1 節では、 $\bar{n} \gg 1$ のときの超流動相から Mott 絶縁相への相転移点の決定、および平

平衡状態における秩序変数の振幅自由度と位相自由度に微小な変調を生じさせる演算子を同定するため、Bose 粒子系に対する Gutzwiller 変分法に基づいた平均場理論を解説する。3.2 節では、個別励起の自由度で表示されていた有効模型を、Higgs モードと NG モードの自由度を用いて明示的に表示することを考える。3.3 節では、Higgs モードと NG モードを平均場上に生じるスピン波励起と見なし、これに関する Holstein–Primakoff 展開を行うことで有効模型を単純化する。3.4 節では、Bogoliubov 変換をそれぞれの分岐に定義し、模型を対角化する。得られた模型が特徴的な分散関係を持つことを明示する。3.5 節では、減衰率を計算する標準的な手法として有限温度の場の量子論を応用し、それぞれのモードの減衰率に対する表式を 1-loop のオーダーで求める。以下、3.1 節から 3.4 節までは [29, 53, 54] で用いられた Gutzwiller 変分法、および [29, 40] で議論された平均場理論に関する結果のレビューである。

3.1 部分 Hilbert 空間における Gutzwiller 変分法

2.2 節で導入した有効模型 (22) を用いて、集団励起である Higgs モードと NG モードの性質を議論したい。一般に集団励起モードは個別励起モードの重ね合わせであるので、Higgs モードと NG モードの性質を議論するためには、それぞれの集団励起モードと個別励起モードの自由度との間にある関係性を同定する必要がある。この節では、この関係性を平均場近似の一種である Gutzwiller 変分法を用いて具体的に決定しよう。

3.1.1 Bose 粒子系における Gutzwiller 変分法

初めに Gutzwiller 変分法について簡単に説明をしよう。一般に、粒子間に働く相互作用が無視できない系では、それが無視できる場合と比較して、それぞれの粒子が各サイトを占有する確率が変化する。Gutzwiller 変分法とは、この相関効果を系の波動関数を展開する可能な占有状態の展開係数に反映させる平均場近似法のことである [55]。元々は強相関電子系が持つ多体相関効果を記述するための手法であったが、Boson 系の相関効果を記述することにも応用可能である [56, 41]。以下では Bose 粒子系に対する Gutzwiller 変分法を概説し、その有効模型 (22) への応用を議論する。

Gutzwiller 変分法の最初のステップは、系の波動関数として変分パラメータを持つ適当な変分関数を仮設することである。もし系全体の波動関数が各サイト上の波動関数の直積に分解できると仮定するならば、その変分関数の一般形は

$$\prod_i \{f_{0i}|0\rangle_i + f_{1i}|1\rangle_i + f_{2i}|2\rangle_i + f_{3i}|3\rangle_i + \dots\}$$

なる形をもつ。ここで $|m\rangle_i$ はサイト i が m 個の Bose 粒子に占有される状態であり、この表式は各サイトにおいて可能な占有状態を重ね合わせた状態より構成される直積状態を表す。展開係数 f_{mi} は複素数に値を持つ変分パラメータであり、変分関数を用いて計算された系の平均エネルギーを各パラメータに関して最小化することで定められる。変分パラメータを有する平均エネルギーは、

平均場近似の範囲内で取り込むことのできるすべての相関効果を含んでいるので、変分条件を介してその相関効果が展開係数に取り込まれるという筋書きである。

この Gutzwiller 変分法を、部分 Hilbert 空間 \mathcal{H}' で記述される系に応用することを考えよう。2.2 節で解説したように、有効模型 (23) が作用する Hilbert 空間 \mathcal{H}' は各サイトに可能な占有状態として 3 つの状態を持つので、それを考慮した Gutzwiller 変分関数は、

$$|\Omega(\theta, \eta, \varphi, \chi)\rangle = \prod_i \left\{ \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) t_{0i}^\dagger + e^{i\eta} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \left(e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\chi}{2}\right) t_{1i}^\dagger + e^{-i\varphi} \cos\left(\frac{\chi}{2}\right) t_{-1i}^\dagger \right) \right\} |\text{vac}\rangle \quad (26)$$

と定義できる。ここで変分関数は規格化条件 $\langle \Omega | \Omega \rangle = 1$ を満たすとする。この条件と波動関数の位相の任意性により変分パラメータは各サイト上に 4 個あり、それを角度の変数 $(\theta, \eta, \varphi, \chi)$ でそれぞれ書き表した。一般に変分パラメータは空間依存性を持つが、(26) 式ではそれを無視した。これは実現する平衡状態が空間依存性を持たない一様な相であることを仮定することに対応する。実際、基底状態において一様な配位が実現することは厳密な数値手法である量子モンテカルロ法を用いた解析により確かめられている。

(26) 式におけるそれぞれの変分パラメータは次のような意味を持つ。 χ は、状態 $|\bar{n}+1\rangle_i$ と状態 $|\bar{n}-1\rangle_i$ の確率的な重みを特徴付ける。この重みが等しいとき、この波動関数は粒子・正孔対称性を持つようになる。実際、この変分関数を用いて求めた平均エネルギーを変分してみるとわかるように、粒子・正孔対称性を有する $h=0$ のとき、 χ は $\pi/2$ に等しくなるので、状態 $|\bar{n}+1\rangle_i$ と状態 $|\bar{n}-1\rangle_i$ の係数は等しい重みを持つようになる。次に φ は、状態 $|\bar{n}+1\rangle_i$ と状態 $|\bar{n}-1\rangle_i$ の間の位相差を特徴付け、後でわかるように秩序変数の位相の自由度に等しい。したがって、これが空間変調を有することが NG モードの励起に対応する。次に θ は、状態 $|\bar{n}\rangle_i$ と $|\bar{n}+1\rangle_i$ と $|\bar{n}-1\rangle_i$ の重ね合わせ状態の間の確率的な重みを特徴付ける。もし $\theta=0$ ならば、この変分関数は平均場近似における Mott 相の波動関数 $\prod_i |\bar{n}\rangle_i = \prod_i t_{0i}^\dagger |\text{vac}\rangle$ に一致する。逆にもし $\theta \neq 0$ ならば、それは Mott 転移点近傍の超流動相の平均場近似における波動関数を与える。転移点から十分に離れた超流動状態はこの変分関数では記述できず、無視した占有状態を考慮に入れた変分関数を用いなければならない。後でわかるように、 $\sin\theta$ は秩序変数の振幅の自由度に等しいので、その空間変調は Higgs モードの励起に対応する。最後に η は、状態 $|\bar{n}\rangle_i$ と $|\bar{n}+1\rangle_i$ と $|\bar{n}-1\rangle_i$ の重ね合わせ状態の間の位相差である。

変分関数 (26) は、種々の物理量に対してその期待値を与える。例えば、ハミルトニアン (11) の期待値は、

$$\frac{E(\theta, \eta, \varphi, \chi)}{N} = \left(\frac{U}{2} + \delta\mu \cos\chi \right) \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - \frac{J\bar{n}z}{4} \sin^2\theta \left(1 + \bar{n}^{-1} \sin^2\left(\frac{\chi}{2}\right) + \sqrt{1 + \bar{n}^{-1}} \sin\chi \cos 2\eta \right) \quad (27)$$

となり、また Bose 演算子 (19) の期待値は、

$$\Psi^*(\theta, \eta, \varphi, \chi) = \frac{1}{2} \sin\theta e^{-i\varphi} \left(\sqrt{\bar{n}+1} e^{-i\eta} \sin\left(\frac{\chi}{2}\right) + \sqrt{\bar{n}} e^{i\eta} \cos\left(\frac{\chi}{2}\right) \right) \quad (28)$$

となる。ここで N はシステムサイズ、 $z = 2d = 6$ は格子の配位数である。これらの表式はそれぞれ、変分パラメータを持つ系の平均エネルギーと秩序変数を表す。(28) 式の形式から、 θ が秩序変数の振幅の自由度に、 φ が位相の自由度に等しいことは容易に理解できる。(27) 式を最小化する条件から各変分パラメータは決まり、それに対応して基底状態 (絶対零度のときの平衡状態) における秩序変数の値、そして基底状態の波動関数が定まる。

3.1.2 Bose-Hubbard 模型の基底状態

(26) 式から (28) 式までを用いて、系の基底状態の性質を平均場近似の範囲内で調べよう。まず超流動・Mott 絶縁体転移の相境界を決定し、次に $\bar{n} \gg 1$ で、なおかつ系が粒子・正孔対称性を持つときの基底状態の波動関数を求める。前者の結果は、 $\bar{n} \gg 1$ のときはもちろん、充填率が低いときにも成り立つ。有効スピン模型を用いた解析のためには、特に後者が重要である。最終的に得られた基底状態の波動関数に対して、秩序変数の振幅と位相の空間変調の生成に対応する波動関数の変化を与える演算子として、Higgs モードと NG モードの演算子の具体的な表式が与えられる。

相境界を決定するために、いくつかの変分パラメータの値を決定しよう。(相境界の決定には、必ずしもすべてのパラメータを決定する必要はない。) まず η と φ に関する (27) 式の変分から

$$\eta = 0, \quad \varphi = \varphi_0 \quad (29)$$

であることがわかる。 φ_0 はある定数である。後者は、自発的に対称性が破れた相においては、位相が一様に揃う向きに任意性があることに対応する。実際、平均エネルギーの表式 (27) が位相に陽に依存しないので、位相の一般的な回転に対してそのエネルギー・コストはゼロである。次に χ に関する変分条件から、 χ が θ と以下のように関係づくことがわかる。

$$\tan \chi = -\frac{2Jz \sqrt{\bar{n}(1+\bar{n})} (1 - \sin^2(\frac{\theta}{2}))}{2\delta\mu + Jz(1 - \sin^2(\frac{\theta}{2}))}. \quad (30)$$

(29) 式と (30) 式より、(19) 式と (20) 式は θ のみに依存する関数となる。

$E(\theta)$ と $\Psi(\theta)$ から θ を消去すると、秩序変数を独立変数とする系の平均エネルギーの表式を得る。秩序変数 Ψ に関する展開は、 θ に関する偶奇性から

$$E(\Psi) = A_2\Psi^2 + A_4\Psi^4 + \dots \quad (31)$$

のようになり、これは第二種相転移の現象論における Ginzburg-Landau 自由エネルギーそのものであることがわかる [57]。展開 (31) における A_2 は基底状態における超流動・Mott 絶縁体転移の相境界を決定し、

$$A_2 = \left(2\bar{n} + 1 + \frac{2\delta\mu + Jz + 4Jz\bar{n}(1+\bar{n})}{\sqrt{(2\delta\mu + Jz)^2 + (2Jz)^2\bar{n}(1+\bar{n})}} \right)^{-1} \\ \times \left(U - \frac{2\delta\mu(2\delta\mu + Jz)}{\sqrt{(2\delta\mu + Jz)^2 + (2Jz)^2\bar{n}(1+\bar{n})}} \right) - Jz$$

で与えられる。条件 $A_2 \equiv 0$ より、この条件から相境界が満たすべき方程式

$$\frac{\delta\mu_{\pm}}{U} = -\frac{1}{8\bar{n}u} \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 - \left(1 + \frac{1}{2\bar{n}}\right) \frac{1}{u} + \frac{1}{(4\bar{n}u)^2}} \quad (32)$$

を得る。この方程式はサイト分断平均場近似法により求められる方程式と一致する [40]。ここで $u = U/(4J\bar{n}z)$ である。

(32) 式を横軸を J/U 、縦軸を $\delta\mu/U$ として平面上に表示した曲線は、2.1 節で与えた Bose–Hubbard 模型の相図と類似することがわかる (図 5(a) を参照)。上側の実線 (赤) は $\delta\mu_+$ に対応する曲線であり、下側の実線 (緑) は $\delta\mu_-$ に対応する曲線である。双方が交わり $\delta\mu_+ = \delta\mu_-$ となる点は、整数の平均粒子数密度を持つ超流動相から対応する充填率を持つ Mott 相への相転移点である。この点は方程式

$$\sqrt{1 - \frac{1}{u} \left(1 + \frac{1}{2\bar{n}}\right) + \frac{1}{(4\bar{n}u)^2}} = 0 \quad (33)$$

を解くことで定められる。実際、 u について解き、解に対応した化学ポテンシャルの値を求めると、転移点 $(u_c, \delta\mu_c(u_c))$ として

$$u_c = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2\bar{n}}\right) + \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{1}{\bar{n}}}, \quad \delta\mu_c = -\frac{1}{8\bar{n}u_c} \quad (34)$$

を得る。

転移点 (34) は原子の充填率 \bar{n} に依存する。もし充填率 \bar{n} が十分に小さいならば、例えば $\bar{n} = 1$ ならば、転移点は

$$u_c = \frac{3 + 2\sqrt{2}}{4}, \quad \delta\mu_c = -\frac{1}{8u_c} \quad (35)$$

のように $\delta\mu = 0$ の直線上から下方へずれた場所に現れる。充填率が大きくなるにつれて u_c は 1 に近づき、転移点 (34) は $\delta\mu = 0$ の直線上に現れるようになる。そして、 $\bar{n} \gg 1$ において、

$$u_c = 1, \quad \delta\mu_c = 0, \quad \bar{n} \gg 1 \quad (36)$$

となる。このような \bar{n} の増大に対する Mott 領域の形状の変化は、図 5(b) に示される。

(36) 式は、有効スピン模型 (22) において $h = 0$ であるとき、すなわち整数充填率に対応するとき、系が $u_c = 1$ において XY 強磁性状態 (超流動相) から無秩序状態 (Mott 絶縁相) へ量子相転移を起こすことを意味する。このように、 $\delta\mu = 0$ のとき、無次元パラメータ $|u_c - u| = |1 - u|$ は Mott 転移点までの距離という意味を持つ。

$\bar{n} \gg 1$ で、なおかつ系が粒子・正孔対称性を持つとき (つまり $\delta\mu = 0$) の基底状態の波動関数を求めよう。このとき、(30) 式から変分パラメータ χ は $\pi/2$ に等しくなることがわかる。このことから、系の平均エネルギーと秩序変数は、

$$E = N \left[\frac{U}{2} \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) - \frac{J\bar{n}z}{2} \sin^2 \theta \right] \quad (37)$$

$$\Psi^* = \sqrt{\frac{\bar{n}}{2}} \sin \theta e^{-i\varphi_0} \quad (38)$$

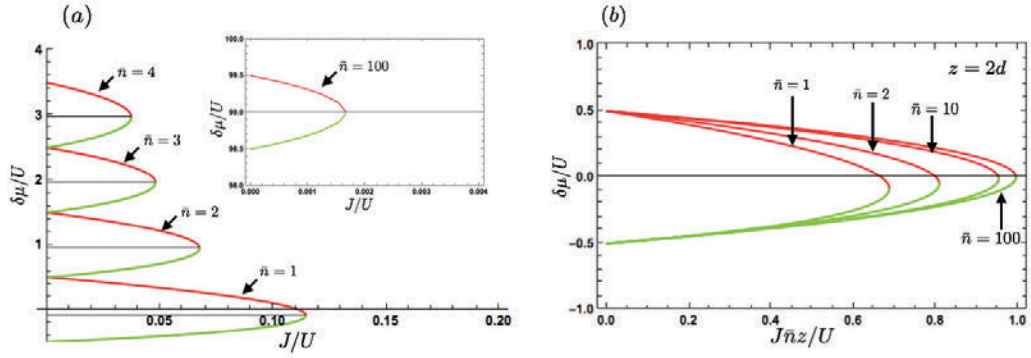


図 5: 部分 Hilbert 空間における Gutzwiller 変分法で与えられた超流動相と Mott 絶縁相の相境界。赤の線は $\delta\mu_+$ により、緑の線は $\delta\mu_-$ により定まる曲線である。縦軸は U で無次元化した化学ポテンシャル $\delta\mu$ である。(a): 横軸として J/U を選び、いくつかの \bar{n} に対して相境界を示した。ここで、化学ポテンシャルの位置を $\delta\mu/U \rightarrow \delta\mu/U + \bar{n} - 1$ として描画した。この相図は、第 2 章で示した Bose-Hubbard 模型の基底状態の相図の概形と類似する。充填率が低い場合には、化学ポテンシャルがゼロの位置と赤と緑の曲線が交わる点とが一致しないことがわかる。他方、充填率が十分に大きい場合には、これらは一致する。(b): 横軸として $J\bar{n}z/U$ を選び、同様にいくつかの \bar{n} に対して相境界を示した。ここで $z = 2d$ である。 \bar{n} を大きくするにつれて、赤と緑の曲線の交点、すなわち Mott 転移点は $u = 1$ に近づく。

となる。(37) 式および (38) 式が持つパラメータは、(37) 式に対する変分条件より定まり、

$$\sin^2\left(\frac{\theta_0}{2}\right) = \frac{1-u}{2} \quad (39)$$

である。この θ_0 から基底状態の波動関数が、

$$|\Omega(\theta_0, 0, \varphi_0, \pi/2)\rangle = \prod_i \left\{ \cos\left(\frac{\theta_0}{2}\right) t_{0i}^\dagger + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\left(\frac{\theta_0}{2}\right) (e^{i\varphi_0} t_{1i}^\dagger + e^{-i\varphi_0} t_{-1i}^\dagger) \right\} |\text{vac}\rangle \quad (40)$$

となることがわかる。(40) 式では、粒子・正孔対称性を反映して、粒子励起状態 t_{1i}^\dagger と正孔励起状態 t_{-1i}^\dagger が等しい確率振幅を持つ。さらに、 $u = 1$ で Mott 相への相転移が起き、そのとき (40) 式が Mott 相のゆらぎを無視した平均場理論における波動関数に等しくなることを確認できる。

3.1.3 Higgs モードと Nambu-Goldstone モード

波動関数 (40) は秩序変数の振幅自由度と位相自由度を展開係数に持つ。もしこれらの自由度に微小な変調が生じたとすると、その形が変化し、そのときの系の状態はもはや平衡状態ではなく微小な励起が生じた状態である。ここでは、これらの自由度に空間変調が生じたときの波動関数の変化を与える演算子として Higgs モードと NG モードの演算子を求める。

平衡状態にある粒子・正孔対称性を持つ超流動相に対して、次のような秩序変数の微小な変調を与えることを考えよう：

$$\theta_0 \rightarrow \theta_0 + \delta\theta_i, \quad \varphi_0 \rightarrow \varphi_0 + \delta\varphi_i \quad (41)$$

この変調に対する波動関数 (40) の変化分は、

$$\begin{aligned} \delta|\Omega\rangle_i &= i\delta\varphi_i \frac{1}{\sqrt{2}} \sin(\theta_0/2) (e^{i\varphi_0} t_{1i}^\dagger - e^{-i\varphi_0} t_{-1i}^\dagger) |\text{vac}\rangle \\ &+ \frac{\delta\theta_i}{2} \left(-\sin(\theta_0/2) t_{0i}^\dagger + \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(\theta_0/2) (e^{i\varphi_0} t_{1i}^\dagger + e^{-i\varphi_0} t_{-1i}^\dagger) \right) |\text{vac}\rangle \end{aligned} \quad (42)$$

である。変調により生じた平衡状態からのずれ (42) は、対応する集団励起モードの励起状態である。演算子 $b_{\alpha i}^\dagger$ と $b_{\varphi i}^\dagger$ をそれぞれ

$$\begin{aligned} b_{\alpha i}^\dagger &= \sin\left(\frac{\theta_0}{2}\right) t_{0i}^\dagger - \frac{1}{\sqrt{2}} \cos\left(\frac{\theta_0}{2}\right) (e^{i\varphi_0} t_{1i}^\dagger + e^{-i\varphi_0} t_{-1i}^\dagger), \\ b_{\varphi i}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{i\varphi_0} t_{1i}^\dagger - e^{-i\varphi_0} t_{-1i}^\dagger) \end{aligned} \quad (43)$$

で定義すると、これらの演算子は Higgs モードと NG モードを励起させる演算子と見なせる。この関係式は、集団励起モードと個別励起モードとを結びつける。

3.1 節の議論をまとめよう。3.1.1 節では議論の出発点を与える部分 Hilbert 空間における Gutwiller 変分法を説明した。3.1.2 節では、それを用いて系の基底状態の性質を議論した。その前半では、基底状態における相境界を求め、後半では、 $\bar{n} \gg 1$ のときの Mott 転移点近傍での基底状態の波動関数を求めた。3.1.3 節では、3.1.2 節で求めた基底状態の波動関数に対して、秩序変数の振幅と位相のゆらぎに対応する励起状態の生成演算子を同定した。それらは (t_1, t_0, t_{-1}) と関係付けられ、個別励起の自由度と集団励起の自由度とを結びつける関係式となる。

3.2 正準変換

前節の変分関数の方法により、集団励起の自由度を個別励起の自由度に関係づけることができた。次に、個別励起の自由度で書かれた有効模型 (22) を集団励起の自由度で書き表すことを考えよう。以下では $\varphi_0 = 0$ とする。超流動相における平均場を生成する演算子 b_{0i}^\dagger を (40) 式 = $\prod_i b_{0i}^\dagger |0\rangle$ と書いて、次のような変換を定義する。

$$\begin{aligned} b_{0i} &= ct_{0i} + \frac{1}{\sqrt{2}} s(t_{1i} + t_{-1i}), \\ b_{\alpha i} &= st_{0i} - \frac{1}{\sqrt{2}} c(t_{1i} + t_{-1i}), \\ b_{\varphi i} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (t_{1i} - t_{-1i}). \end{aligned} \quad (44)$$

ここで、 $(c, s) \equiv (\cos(\theta_0/2), \sin(\theta_0/2))$ である。簡単な計算から確かめられるように、 $b_{mi}^\dagger (m = 0, \alpha, \varphi)$ は、 $t_{mi}^\dagger (m = 0, +1, -1)$ と同様に、交換関係

$$[b_{mi}, b_{nj}^\dagger] = \delta_{m,n} \delta_{i,j}, \quad [b_{mi}, b_{nj}] = [b_{mi}^\dagger, b_{nj}^\dagger] = 0 \quad (45)$$

を満たし、さらに拘束条件

$$b_{0i}^\dagger b_{0i} + b_{\alpha i}^\dagger b_{\alpha i} + b_{\varphi i}^\dagger b_{\varphi i} = 1 \quad (46)$$

を満足する。演算子のこのような性質 (45) および (46) は、変換 (44) を定義する行列

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} -\frac{c}{\sqrt{2}} & \frac{s}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ s & c & 0 \\ -\frac{c}{\sqrt{2}} & \frac{s}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (47)$$

が実はユニタリ行列であることに由来する。したがって、形式的に定義した変換 (44) は、物理量を表す演算子の (Mott 絶縁相における平均場 t_0 、1 粒子励起 t_1 、1 正孔励起 t_{-1}) 表示を (超流動相における平均場 b_0 、Higgs 集団励起 b_α 、NG 集団励起 b_φ) 表示に変換する正準変換を与える。

有効模型を表示する変数の、以前の変数 $\mathbf{t}_i \equiv (t_{1i}, t_{0i}, t_{-1i})$ から新しい変数 $\mathbf{b}_i \equiv (b_{\alpha i}, b_{0i}, b_{\varphi i})$ への変換を実際に行うのに、行列

$$\mathbf{M}_1 = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (48)$$

を導入し、 \mathbf{t}_i で書かれたスピン演算子 (23) を形式的に

$$S^+ = \mathbf{t}^\dagger \mathbf{M}_1 \mathbf{t}, \quad S^- = \mathbf{t}^\dagger \mathbf{M}_2 \mathbf{t}, \quad S^z = \mathbf{t}^\dagger \mathbf{M}_3 \mathbf{t}, \quad (S^z)^2 = \mathbf{t}^\dagger (\mathbf{M}_3)^2 \mathbf{t} \quad (49)$$

と書き表しておくくと便利である。なぜならば、このとき正準変換 (44) は単なる行列 \mathbf{M}_i の基底変換

$$\mathbf{b}^\dagger = \mathbf{t}^\dagger \mathbf{U}, \quad \mathbf{b} = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{t}, \quad \tilde{\mathbf{M}}_i = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{M}_i \mathbf{U} \quad (50)$$

と見なされ、すべての計算は単純な行列の積の計算に帰着されるからである。(50) 式は以前の基底 \mathbf{t}_i から新しい基底 \mathbf{b}_i への変換を、行列の変換 $\mathbf{M}_i \rightarrow \tilde{\mathbf{M}}_i$ に読み替える。新しい基底での行列 $\tilde{\mathbf{M}}_i$ は、

$$\tilde{\mathbf{M}}_1 = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{M}_1 \mathbf{U} = \begin{pmatrix} -2sc & s^2 - c^2 & -s \\ s^2 - c^2 & 2sc & -c \\ s & c & 0 \end{pmatrix}, \quad (51)$$

$$\tilde{\mathbf{M}}_2 = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{M}_2 \mathbf{U} = \begin{pmatrix} -2sc & s^2 - c^2 & s \\ s^2 - c^2 & 2sc & c \\ -s & -c & 0 \end{pmatrix}, \quad (52)$$

$$\tilde{\mathbf{M}}_3 = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{M}_3 \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -c \\ 0 & 0 & s \\ -c & s & 0 \end{pmatrix}, \quad (\tilde{\mathbf{M}}_3)^2 = \mathbf{U}^\dagger (\mathbf{M}_3)^2 \mathbf{U} = \begin{pmatrix} c^2 & -sc & 0 \\ -sc & s^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (53)$$

で与えられる。これらの行列を用いると、新しい基底 \mathbf{b}_i で表示されたスピン演算子は、

$$S^+ = \mathbf{b}^\dagger \tilde{\mathbf{M}}_1 \mathbf{b}, \quad S^- = \mathbf{b}^\dagger \tilde{\mathbf{M}}_2 \mathbf{b}, \quad S^z = \mathbf{b}^\dagger \tilde{\mathbf{M}}_3 \mathbf{b}, \quad (S^z)^2 = \mathbf{b}^\dagger (\tilde{\mathbf{M}}_3)^2 \mathbf{b}, \quad (54)$$

と書き表される。行列形式を用いず、明示的な形に書き下すと、

$$S_i^+ = 2scb_{0i}^\dagger b_{0i} - 2scb_{\alpha i}^\dagger b_{\alpha i} + (s^2 - c^2)(b_{\alpha i}^\dagger b_{0i} + b_{0i}^\dagger b_{\alpha i}) - s(b_{\alpha i}^\dagger b_{\varphi i} - b_{\varphi i}^\dagger b_{\alpha i}) - c(b_{0i}^\dagger b_{\varphi i} - b_{\varphi i}^\dagger b_{0i}), \quad (55)$$

$$S_i^- = 2scb_{0i}^\dagger b_{0i} - 2scb_{\alpha i}^\dagger b_{\alpha i} + s(b_{\alpha i}^\dagger b_{\varphi i} - b_{\varphi i}^\dagger b_{\alpha i}) + c(b_{0i}^\dagger b_{\varphi i} - b_{\varphi i}^\dagger b_{0i}), \quad (56)$$

$$S_i^z = -c(b_{\alpha i}^\dagger b_{\varphi i} + b_{\varphi i}^\dagger b_{\alpha i}) + s(b_{0i}^\dagger b_{\varphi i} + b_{\varphi i}^\dagger b_{0i}), \quad (57)$$

$$(S_i^z)^2 = s^2 b_{0i}^\dagger b_{0i} + c^2 b_{\alpha i}^\dagger b_{\alpha i} - sc(b_{\alpha i}^\dagger b_{0i} + b_{0i}^\dagger b_{\alpha i}) + b_{\varphi i}^\dagger b_{\varphi i} \quad (58)$$

となる。

(55) 式から (58) 式までを有効模型 (22) がもつそれぞれの項に代入することで、新しい変数 \mathbf{b}_i で書かれた有効模型を得る。まず、単一イオン異方性項と磁場との結合項は、

$$\frac{U}{2} \sum_i (S_i^z)^2 = \frac{U}{2} \sum_i [(c^2 - s^2)b_{\alpha i}^\dagger b_{\alpha i} + c^2 b_{\varphi i}^\dagger b_{\varphi i} - sc(b_{\alpha i}^\dagger b_{0i} + b_{0i}^\dagger b_{\alpha i}) + s^2], \quad (59)$$

$$-h \sum_i S_i^z = h \sum_i [c(b_{\alpha i}^\dagger b_{\varphi i} + b_{\varphi i}^\dagger b_{\alpha i}) - s(b_{0i}^\dagger b_{\varphi i} + b_{\varphi i}^\dagger b_{0i})] \quad (60)$$

と書き表される。磁場との結合項 (60) が 2 次の項において $b_\alpha^\dagger b_\varphi$ のような形で Higgs モードと NG モードを混成させることに注意せよ。ここでは説明の便宜上、このような混成項があるとして議論を進めたが、以降では整数充填率、つまり粒子・正孔対称性を考えることにして、 $h = 0$ とする。この項を考慮に入れた場合の議論の本質的な変更点のみを述べておくことにすると、3.4 節の Bogoliubov 変換を Higgs モードの分岐と NG モードの分岐のそれぞれにおいて別々に実行するのではなくて、これらを同時に考察しなければならない。つまり、 2×2 行列の 2 つの変換を 4×4 行列の 1 つの変換として扱わなければならない。

同様に、XY 項は次のように書き表される。

$$\begin{aligned}
& \frac{J\bar{n}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^+ S_j^- + \text{h.c.}) \\
&= \sum_{\langle i,j \rangle} 4J\bar{n}s^2 c^2 b_{0i}^\dagger b_{0i} b_{0j}^\dagger b_{0j} - \sum_{\langle i,j \rangle} 8J\bar{n}s^2 c^2 b_{0i}^\dagger b_{0i} b_{\alpha j}^\dagger b_{\alpha j} + \sum_{\langle i,j \rangle} 4J\bar{n}s^2 c^2 b_{\alpha i}^\dagger b_{\alpha i} b_{\alpha j}^\dagger b_{\alpha j} \\
&+ \sum_{\langle i,j \rangle} J\bar{n}(c^2 - s^2)^2 (b_{\alpha i}^\dagger b_{0i} b_{\alpha j}^\dagger b_{0j} + b_{0i}^\dagger b_{\alpha i} b_{\alpha j}^\dagger b_{0j} + b_{\alpha j}^\dagger b_{0j} b_{0i}^\dagger b_{\alpha i} + b_{0i}^\dagger b_{\alpha i} b_{0j}^\dagger b_{\alpha j}) \\
&- \sum_{\langle i,j \rangle} J\bar{n}c^2 (b_{0i}^\dagger b_{\varphi i} b_{0j}^\dagger b_{\varphi j} - b_{\varphi i}^\dagger b_{0i} b_{0j}^\dagger b_{\varphi j} + b_{\varphi j}^\dagger b_{0j} b_{\varphi i}^\dagger b_{0i} - b_{0i}^\dagger b_{\varphi i} b_{\varphi j}^\dagger b_{0j}) \\
&- \sum_{\langle i,j \rangle} J\bar{n}s^2 (b_{\alpha i}^\dagger b_{\varphi i} b_{\alpha j}^\dagger b_{\varphi j} - b_{\varphi i}^\dagger b_{\alpha i} b_{\alpha j}^\dagger b_{\varphi j} + b_{\varphi j}^\dagger b_{\alpha j} b_{\varphi i}^\dagger b_{\alpha i} - b_{\alpha i}^\dagger b_{\varphi i} b_{\varphi j}^\dagger b_{\alpha j}) \\
&- \sum_{\langle i,j \rangle} 4J\bar{n}sc^2 (c^2 - s^2) (b_{0i}^\dagger b_{0i} b_{\alpha j}^\dagger b_{0j} + b_{0i}^\dagger b_{0i} b_{0j}^\dagger b_{\alpha j}) \\
&+ \sum_{\langle i,j \rangle} 4J\bar{n}sc^2 (c^2 - s^2) (b_{\alpha i}^\dagger b_{\alpha i} b_{\alpha j}^\dagger b_{0j} + b_{\alpha i}^\dagger b_{\alpha i} b_{0j}^\dagger b_{\alpha j}) \\
&- \sum_{\langle i,j \rangle} 2J\bar{n}sc (b_{\alpha i}^\dagger b_{\varphi i} b_{0j}^\dagger b_{\varphi j} - b_{\alpha i}^\dagger b_{\varphi i} b_{\varphi j}^\dagger b_{0j} + b_{\varphi i}^\dagger b_{\alpha i} b_{\varphi j}^\dagger b_{0j} - b_{\varphi i}^\dagger b_{\alpha i} b_{0j}^\dagger b_{\varphi j})
\end{aligned} \tag{61}$$

こうして、有効模型を、新しい基底 \mathbf{b}_i を用いて、Higgs モードと NG モードの自由度を明示的した表式に書き表すことができた。

3.3 Holstein–Primakoff 展開 (スピン波理論)

先に説明したように、演算子 $b_{\alpha i}^\dagger$ と $b_{\varphi i}^\dagger$ は平均場状態 $\prod_i b_{0i}^\dagger |0\rangle$ の上に振幅と位相のゆらぎを生成する。今、このゆらぎが十分に小さいと仮定して、有効模型 (22) を簡単化することを考えよう。有効模型が持つ $b_m^\dagger b_0$ 項に着目しよう。拘束条件 (46) を平方完成し、 b_{0i} を $b_{\alpha(\varphi)i}^\dagger$ で書き表した後、これに関して Taylor 展開することで、有効模型から (b_0, b_0^\dagger) を消去することを考える。つまり、

$$\begin{aligned}
b_m^\dagger b_0 &= b_m^\dagger \sqrt{1 - b_\alpha^\dagger b_\alpha - b_\varphi^\dagger b_\varphi} \\
&\approx b_m^\dagger - \frac{1}{2} b_m^\dagger b_\alpha^\dagger b_\alpha - \frac{1}{2} b_m^\dagger b_\varphi^\dagger b_\varphi + \dots
\end{aligned} \tag{62}$$

なる展開を考える。この展開 (62) は有効模型から b_0 を消去する。このようなやり方で Schwinger boson から一種類 (ここでは b_0) を消去する操作を Holstein–Primakoff 展開と呼ぶ [58, 59]。

(62) 式の展開は 2 次までで切断するものとしよう。つまり、以下では演算子 $b_{\alpha(\varphi)i}^\dagger$ について 3 次の項までを考慮に入れることにして、それ以上の次数の項は無視する。このような近似は、今のように 3 次元系を考えているときには正当化される。一般に、2 次元以下の有限温度系においては、長距離秩序を持つ秩序相は存在できないため、(62) のような平均場の存在を仮定するスピン波励起に関する展開は無限次数まで考慮されなければならない。これは Mermin–Wagner の定理 [60]、もしくは Coleman の定理 [61] からの帰結である。

展開 (62) の結果、有効模型は 4 つの部分からなるハミルトニアン

$$H_{\text{eff}} \equiv H_{\text{eff}}^{(0)} + H_{\text{eff}}^{(1)} + H_{\text{eff}}^{(2)} + H_{\text{eff}}^{(3)}, \tag{63}$$

$$H_{\text{eff}}^{(0)} = \sum_i \left(\frac{U}{2} s^2 - 2J\bar{n}_z s^2 c^2 \right), \quad (64)$$

$$H_{\text{eff}}^{(1)} = \sum_i 2J\bar{n}_z s c \left(c^2 - s^2 - \frac{U}{4J\bar{n}_z} \right) (b_{\alpha i}^\dagger + b_{\alpha i}), \quad (65)$$

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}}^{(2)} = & \sum_i 2J\bar{n}_z \left(4s^2 c^2 + \frac{U}{4J\bar{n}_z} (c^2 - s^2) \right) b_{\alpha i}^\dagger b_{\alpha i} \\ & + \sum_i 2J\bar{n}_z \left(2s^2 c^2 + \frac{U}{4J\bar{n}_z} c^2 \right) b_{\varphi i}^\dagger b_{\varphi i} \\ & - \sum_{\langle i,j \rangle} J\bar{n} (c^2 - s^2)^2 (b_{\alpha i}^\dagger b_{\alpha j}^\dagger + b_{\alpha i} b_{\alpha j} + b_{\alpha i}^\dagger b_{\alpha j} + b_{\alpha i} b_{\alpha j}^\dagger) \\ & + \sum_{\langle i,j \rangle} J\bar{n} c^2 (b_{\varphi i} b_{\varphi j} - b_{\varphi i} b_{\varphi j}^\dagger + b_{\varphi i}^\dagger b_{\varphi j}^\dagger - b_{\varphi i}^\dagger b_{\varphi j}), \end{aligned} \quad (66)$$

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}}^{(3)} = & - \sum_i J\bar{n}_z s c \left(c^2 - s^2 - \frac{U}{4J\bar{n}_z} \right) (b_{\alpha i}^\dagger b_{\alpha i}^\dagger b_{\alpha i} + b_{\alpha i}^\dagger b_{\alpha i} b_{\alpha i} + b_{\alpha i}^\dagger b_{\varphi i}^\dagger b_{\varphi i} + b_{\alpha i} b_{\varphi i}^\dagger b_{\varphi i}) \\ & - \sum_{\langle i,j \rangle} 8J\bar{n} s c (c^2 - s^2) (b_{\alpha i}^\dagger b_{\alpha i} b_{\alpha j}^\dagger + b_{\alpha i}^\dagger b_{\alpha i} b_{\alpha j}) \\ & - \sum_{\langle i,j \rangle} 4J\bar{n} s c (c^2 - s^2) (b_{\varphi i}^\dagger b_{\varphi i} b_{\alpha j}^\dagger + b_{\varphi i}^\dagger b_{\varphi i} b_{\alpha j}) \\ & + \sum_{\langle i,j \rangle} 2J\bar{n} s c (b_{\alpha i}^\dagger b_{\varphi i} b_{\varphi j} - b_{\alpha i}^\dagger b_{\varphi i} b_{\varphi j}^\dagger - b_{\alpha i} b_{\varphi i}^\dagger b_{\varphi j} + b_{\alpha i} b_{\varphi i}^\dagger b_{\varphi j}^\dagger) \end{aligned} \quad (67)$$

となる。ここで、Schwinger boson $b_{\alpha(\varphi)}$ に対する Fourier 変換

$$b_{mi}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{B.Z.}} b_{m\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{k}}, \quad b_{mi} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{B.Z.}} b_{m\mathbf{k}} e^{i\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{k}}, \quad m = (\alpha, \varphi) \quad (68)$$

を定義し、有効模型の Fourier 表示を求めよう。 $\mathbf{x}_i = a(i_x, i_y, i_z)$ は格子点を指定する 3次元ベクトルである。 $i_{x,y,z}$ は格子点をラベルする整数である。以下では、 $a = 1$ とする。波数ベクトル \mathbf{k} に関する総和は、第 1 Brillouin ゾーンに属するすべての波数ベクトルにわたって行われる。以下、特に断りがない限り波数ベクトルに関する総和の記号はこの意味であるとする。変換は単に定義 (68) を代入することで実行され、その結果は、

$$H_{\text{eff}}^{(0)} = N \left(\frac{U}{2} s^2 - 2J\bar{n}_z s^2 c^2 \right) \quad (69)$$

$$H_{\text{eff}}^{(1)} = 2J\bar{n}_z s c \sqrt{N} \left(c^2 - s^2 - \frac{U}{4J\bar{n}_z} \right) (b_{\alpha\mathbf{0}}^\dagger + b_{\alpha\mathbf{0}}) \quad (70)$$

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}}^{(2)} = & \sum_{\mathbf{k}} B_1(\mathbf{k}) b_{\alpha\mathbf{k}}^\dagger b_{\alpha\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} B_2(\mathbf{k}) (b_{\alpha\mathbf{k}}^\dagger b_{\alpha-\mathbf{k}}^\dagger + b_{\alpha\mathbf{k}} b_{\alpha-\mathbf{k}} + b_{\alpha\mathbf{k}} b_{\alpha\mathbf{k}}^\dagger + b_{\alpha\mathbf{k}}^\dagger b_{\alpha\mathbf{k}}) \\ & + \sum_{\mathbf{k}} C_1(\mathbf{k}) b_{\varphi\mathbf{k}}^\dagger b_{\varphi\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} C_2(\mathbf{k}) (b_{\varphi\mathbf{k}}^\dagger b_{\varphi-\mathbf{k}}^\dagger + b_{\varphi\mathbf{k}} b_{\varphi-\mathbf{k}} - b_{\varphi\mathbf{k}} b_{\varphi\mathbf{k}}^\dagger - b_{\varphi\mathbf{k}}^\dagger b_{\varphi\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (71)$$

$$\begin{aligned}
H_{\text{eff}}^{(3)} = & \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} D_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) (b_{\alpha\mathbf{k}_1}^\dagger b_{\alpha\mathbf{k}_2}^\dagger b_{\alpha\mathbf{k}_3} + b_{\alpha\mathbf{k}_1}^\dagger b_{\varphi\mathbf{k}_2}^\dagger b_{\varphi\mathbf{k}_3} + \text{h.c.}) \\
& + \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} D_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) (b_{\varphi\mathbf{k}_1}^\dagger b_{\varphi\mathbf{k}_2} b_{\alpha\mathbf{k}_3} + \text{h.c.}) \\
& + \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} D_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) (b_{\alpha\mathbf{k}_1}^\dagger b_{\alpha\mathbf{k}_2} b_{\alpha\mathbf{k}_3} + \text{h.c.}) \\
& + \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} D_4(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) (b_{\alpha\mathbf{k}_1}^\dagger b_{\varphi\mathbf{k}_2} b_{\varphi\mathbf{k}_3} - b_{\varphi\mathbf{k}_1} b_{\alpha\mathbf{k}_2}^\dagger b_{\varphi\mathbf{k}_3}^\dagger + \text{h.c.})
\end{aligned} \tag{72}$$

ここで係数は

$$B_1(\mathbf{k}) = 2J\bar{n}z(4s^2c^2 + u(c^2 - s^2)), \quad B_2(\mathbf{k}) = -\frac{J\bar{n}z}{2}(c^2 - s^2)^2\gamma_{\mathbf{k}}, \tag{73}$$

$$C_1(\mathbf{k}) = 2J\bar{n}z(2s^2c^2 + uc^2), \quad C_2(\mathbf{k}) = \frac{J\bar{n}z}{2}c^2\gamma_{\mathbf{k}}, \tag{74}$$

$$D_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = -\frac{1}{\sqrt{N}}J\bar{n}zsc(c^2 - s^2 - u)\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_3}, \tag{75}$$

$$D_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = -\frac{1}{\sqrt{N}}2J\bar{n}zsc(c^2 - s^2)\gamma_{\mathbf{k}_3}\delta_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3}, \tag{76}$$

$$D_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = -\frac{1}{\sqrt{N}}4J\bar{n}zsc(c^2 - s^2)\gamma_{\mathbf{k}_3}\delta_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3}, \tag{77}$$

$$D_4(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = \frac{1}{\sqrt{N}}J\bar{n}zsc\gamma_{\mathbf{k}_3}\delta_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_3} \tag{78}$$

で定義され、すべて実数である。また、バンドの異方性を表す $\gamma_{\mathbf{k}}$ は、 \mathbf{e} を隣接するすべての最近接格子点へ向く単位ベクトルとすると

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\mathbf{e}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}} \tag{79}$$

で定義される。

係数 (73-78) は $s = \sin(\theta/2)$ および $c = \cos(\theta/2)$ を含む。ここで (39) 式より、

$$c^2 - s^2 = u, \quad sc = \frac{\sqrt{1-u^2}}{2}$$

なので、係数 (73-78) は、

$$B_1(\mathbf{k}) = 2J\bar{n}z, \quad B_2(\mathbf{k}) = -\frac{J\bar{n}z}{2}u^2\gamma_{\mathbf{k}}, \tag{80}$$

$$C_1(\mathbf{k}) = J\bar{n}z(1+u), \quad C_2(\mathbf{k}) = \frac{J\bar{n}z}{4}(1+u)\gamma_{\mathbf{k}}, \tag{81}$$

$$D_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = 0, \tag{82}$$

$$D_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = -\frac{1}{\sqrt{N}}J\bar{n}zu\sqrt{1-u^2}\gamma_{\mathbf{k}_3}\delta_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3}, \tag{83}$$

$$D_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = -\frac{1}{\sqrt{N}}2J\bar{n}zu\sqrt{1-u^2}\gamma_{\mathbf{k}_3}\delta_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3}, \tag{84}$$

$$D_4(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = \frac{1}{\sqrt{N}}\frac{J\bar{n}z}{2}\sqrt{1-u^2}\gamma_{\mathbf{k}_3}\delta_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_3} \tag{85}$$

となる。

3.4 Bogoliubov 変換

模型 (63) の 2 次の項 $H_{\text{eff}}^{(2)}$ を Bogoliubov 変換を用いて対角化しよう。 $H_{\text{eff}}^{(2)}$ は $b_\alpha b_\varphi$ のような異なる分岐間の混成項を持たないため、Bogoliubov 変換はそれぞれの分岐において独立に実行できる。このことを考慮して

$$b_{m\mathbf{k}} = u_{m\mathbf{k}}\beta_{m\mathbf{k}} + v_{m-\mathbf{k}}^*\beta_{m-\mathbf{k}}^\dagger, \quad b_{m\mathbf{k}}^\dagger = u_{m\mathbf{k}}^*\beta_{m\mathbf{k}}^\dagger + v_{m-\mathbf{k}}\beta_{m-\mathbf{k}} \quad (86)$$

のような線形変換を考えよう。新しく導入された演算子 $(\beta_{\alpha\mathbf{k}}, \beta_{\alpha\mathbf{k}}^\dagger)$ と $(\beta_{\varphi\mathbf{k}}, \beta_{\varphi\mathbf{k}}^\dagger)$ は、それぞれ Higgs 分岐と NG 分岐における新しい力学変数である。これらの新しい演算子は以前の演算子と同じ交換関係

$$[\beta_{m\mathbf{p}}, \beta_{n\mathbf{q}}^\dagger] = \delta_{n,m}\delta_{\mathbf{p},\mathbf{q}} \quad (87)$$

に従うと仮定する。この要請から線形変換の変換係数は条件

$$|u_{m\mathbf{k}}|^2 - |v_{m-\mathbf{k}}|^2 = 1 \quad (88)$$

を満足しなければならない。条件 (88) を満たす変換係数を

$$u_{\alpha\mathbf{k}} = \cosh\vartheta_{\alpha\mathbf{k}}, \quad v_{\alpha\mathbf{k}} = \sinh\vartheta_{\alpha\mathbf{k}}, \quad (89)$$

$$u_{\varphi\mathbf{k}} = \cosh\vartheta_{\varphi\mathbf{k}}, \quad v_{\varphi\mathbf{k}} = \sinh\vartheta_{\varphi\mathbf{k}} \quad (90)$$

のような形に求めよう。ここで $\vartheta_{\alpha(\varphi)\mathbf{k}}$ は変換の回転角であるとする。変換 (86) を代入した $H_{\text{eff}}^{(2)}$ が $\beta_\alpha^\dagger\beta_\alpha$ のような非対角項を持たない要請から、変換の回転角 $\vartheta_{\alpha(\varphi)\mathbf{k}}$ は

$$\coth(2\vartheta_{\alpha\mathbf{k}}) = -\frac{B_1(\mathbf{k}) + 2B_2(\mathbf{k})}{2B_2(\mathbf{k})}, \quad \coth(2\vartheta_{\varphi\mathbf{k}}) = -\frac{C_1(\mathbf{k}) - 2C_2(\mathbf{k})}{2C_2(\mathbf{k})} \quad (91)$$

を満たす。したがって、変換係数は

$$u_{\alpha\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{2 - u^2\gamma_{\mathbf{k}}}{4\sqrt{1 - u^2\gamma_{\mathbf{k}}}}} + \frac{1}{2}, \quad v_{\alpha\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{2 - u^2\gamma_{\mathbf{k}}}{4\sqrt{1 - u^2\gamma_{\mathbf{k}}}}} - \frac{1}{2} \quad (92)$$

$$u_{\varphi\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{2 - \gamma_{\mathbf{k}}}{4\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}}}} + \frac{1}{2}, \quad v_{\varphi\mathbf{k}} = -\text{sgn}(\gamma_{\mathbf{k}}) \sqrt{\frac{2 - \gamma_{\mathbf{k}}}{4\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}}}} - \frac{1}{2} \quad (93)$$

となる。ここで $\text{sgn}(x)$ は符号関数であり、

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} 1 & (x \geq 0) \\ -1 & (x < 0) \end{cases} \quad (94)$$

で定義される。この因子は、 $v_{\varphi\mathbf{k}}$ の符号が $\gamma_{\mathbf{k}}$ の符号により定まることを考慮して導入された。

こうして、変換係数 (92) と (93) から対角化されたハミルトニアンを求めることができ、

$$H_{\text{eff}} = \sum_{m,\mathbf{k}} \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^m \beta_{m\mathbf{k}}^\dagger \beta_{m\mathbf{k}} + H_{\text{eff}}^{(3)}(\beta_{m\mathbf{k}}, \beta_{m\mathbf{k}}^\dagger) \quad (95)$$

となる。ここで、 $H_{\text{eff}}^{(3)}(\beta_{m\mathbf{k}}, \beta_{m\mathbf{k}}^\dagger)$ は (63) 式における (b_α, b_φ) で表示された $H_{\text{eff}}^{(3)}$ に変換 (86) を代入したものであり、 $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{\alpha(\varphi)}$ は

$$\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\alpha = 2J\bar{n}z\sqrt{1-u^2}\gamma_{\mathbf{k}}, \quad \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\varphi = J\bar{n}z(1+u)\sqrt{1-\gamma_{\mathbf{k}}} \quad (96)$$

である。得られた模型の形から $\beta_{\alpha\mathbf{k}}^\dagger$ と $\beta_{\varphi\mathbf{k}}^\dagger$ は Higgs 分岐と NG 分岐にそれぞれ $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\alpha$ と $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\varphi$ の励起エネルギーを持った準粒子 (慣用的に Bogolon と呼ばれる) を生成する演算子と理解できる。ここで、これら準粒子の真空が以前の真空と異なることに注意しておこう。この新しい表示においては、系に励起状態が生成されることは、新しい真空上に準粒子が生成されることに読み替えられる。図 6 に示すように、 $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\alpha$ はバンドの中心において有限のエネルギーギャップを持ち、 $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\varphi$ はギャップレスである。(図 6 では $u = 0.9$ のときの分散関係を示した。簡単のため $d = 1$ のときのものを示した。) 前者のエネルギー・ギャップを Δ とすると、それは $\Delta = 2J\bar{n}z\sqrt{1-u^2}$ のように $u = 1$ においてゼロとなる (図 7 を参照)。つまり、Mott 絶縁相への相転移点に近づくにつれて $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\alpha$ のギャップは閉じていき、ちょうど転移点直上においてギャップレスとなる。

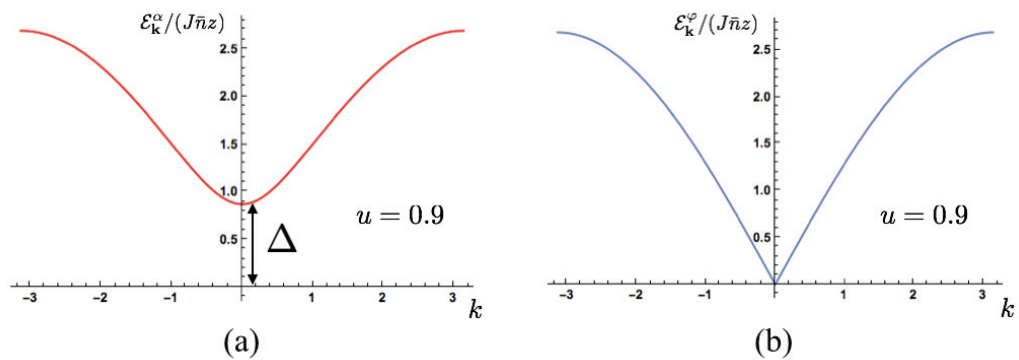


図 6: (a)Higgs 分岐と (b)NG 分岐における準粒子励起のスペクトル。Higgs 分岐においては、基底状態と励起状態の間に有限のエネルギーギャップがあるが、一方 NG 分岐においては、励起エネルギーはギャップレスである。Higgs ギャップは転移点に近づくにつれて閉じていき、転移点直上においてギャップレスとなる (図 7 を参照)。

分散関係の長波長領域 $|\mathbf{k}| \ll 1$ における表式は、それ自身特徴的な構造を持つ。このとき分散関係 (96) は

$$\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\alpha \approx \sqrt{\Delta^2 + c_{\text{h}}^2|\mathbf{k}|^2}, \quad \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\varphi \approx c_{\text{ng}}|\mathbf{k}| \quad (97)$$

のような形を持つ。ここで、 $c_{\text{hg}} = 2J\bar{n}\sqrt{z}u$ であり、 $c_{\text{ng}} = J\bar{n}\sqrt{z}(1+u)$ である。前者は質量 Δ を持った相対論的な粒子のエネルギー分散であり、後者は相対論的な無質量粒子のエネルギー分散であることがわかる。

準粒子間の相互作用を記述する $H_{\text{eff}}^{(3)}(\beta_{m\mathbf{k}}, \beta_{m\mathbf{k}}^\dagger)$ は、図 8 に示すような各過程の前後で準粒子数を保存しない相互作用項を持つ。図 8(a)(b) は散乱の前後が常に Higgs 準粒子でつぎているので、Higgs 分岐における閉じた相互作用過程を与える。例えば、図 8(a) は、もし時間の流れが左から右

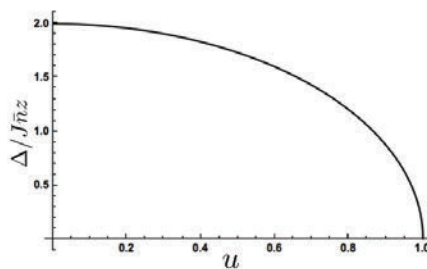


図 7: Higgs ギャップの u 依存性。Mott 転移点 $u = 1$ に近づくにつれて閉じていき、ちょうど転移点直上においてギャップレスとなる。

へ向いているとするならば、一つのある波数をもった Higgs 準粒子が二つの Higgs 準粒子に崩壊する過程を表す。一方で、図 8(c) から (e) は散乱の前後に Higgs 準粒子だけでなく NG 準粒子も現れ、Higgs 準粒子と NG 準粒子間の相互作用過程を与える。例えば、図 8(e) は、もし時間の流れが左から右へ向いているとするならば、一つのある波数をもった Higgs 準粒子が二つの NG 準粒子に崩壊する過程を表す。

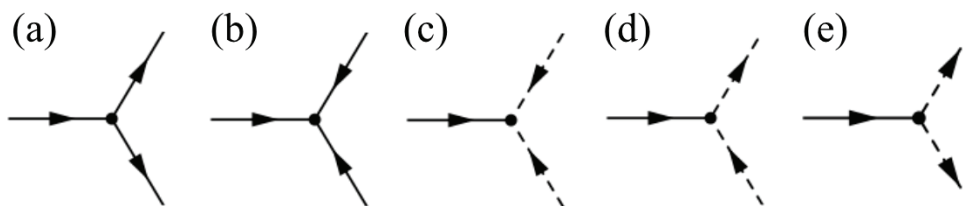


図 8: 有効模型 (95) が持つ準粒子間の相互作用項のそれぞれに対応する図式。実線は Higgs モードであり、破線は NG モードである。相互作用項の可能な形は (a) から (e) までの 5 種類であり、これらの項に対するエルミート共役まで含めると 10 種類である。準粒子は図中に示された頂点においてお互いに相互作用し、内向きの矢印は準粒子の消滅を、外向きの矢印は生成を表す。

3.1 節から 3.4 節までの議論で、対角化された 2 次の項と 3 次の相互作用項を持つハミルトニアン (95) を求めることができた。ハミルトニアン (95) は集団励起間の相互作用を記述し、その相互作用は各準粒子に有限の寿命を与える。以下の節では、このようなハミルトニアンから出発して集団励起の減衰を解析するための手法を与える。

3.5 有限温度の場の量子論

前節で説明したように、系の集団励起の減衰を調べるためには、励起状態を生成する準粒子の寿命を計算すれば良い。有限温度においてそれを実行するために、有限温度の場の理論の方法をハミルトニアン (95) に適用しよう (場の理論に関する形式的な議論は、例えば [3, 62, 63, 64] を参照)。このような手法がよく知られた応用例の中で、特に今回の解析と関連性のあるものとしては、光格子中の Bose 原子気体の弱相関領域における主要な低エネルギー集団励起である Bogoliubov モードの減衰の解析が挙げられる [65, 66]。

有限温度の場の理論では、虚時間方向の自由度を持つ演算子とその積の期待値で定義される種々の相関関数が主要な役割を担う。特に、減衰率を計算する目的には、虚時間依存性、あるいは松原振動数依存性を持つ生成演算子と消滅演算子の積の期待値である 1 粒子有限温度 Green's 関数が重要である。場の理論の一般論によれば、1 粒子 Green's 関数を複素平面に解析接続して得られる複素関数は、複素平面上の上半面において正則な遅延 Green's 関数の部分と、下半面において正則な先進 Green's 関数の部分とに分けることができる。そして、前者の遅延 Green's 関数が持つ自己エネルギーの虚部は、準粒子のもつエネルギーを中心とした、スペクトル関数のピーク幅と解釈できる。したがって、ちょうど系の準粒子エネルギーにおける遅延 Green's 関数の自己エネルギーの虚部が準粒子の寿命を与える。

Higgs モードと NG モードの減衰率を計算するためには、それぞれの分岐に属する準粒子に対して 1 粒子 Green's 関数を定義し、その解析接続として遅延 Green's 関数を求め、その自己エネルギーを求める必要がある。以下では各分岐に対してこの手順を実行する。3.5.1 節では、Higgs モードの自己エネルギーを場の理論における摂動展開を用いて計算する。計算は最低次の量子補正を与える 1-loop の範囲内で行われる。NG モードについての同様の議論は、続く 3.5.2 節で行われる。

3.5.1 Higgs モードの自己エネルギー

この節では Higgs モードの減衰率を求めることを考えよう。Higgs 分岐の素励起である準粒子 $(\beta_{\alpha\mathbf{k}}, \beta_{\alpha\mathbf{k}}^\dagger)$ の 1 粒子 Green's 関数 $\langle \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} \rangle$ を

$$\langle \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} \rangle \equiv \frac{\int \mathcal{D}(\beta, \bar{\beta}) \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} \exp(-S_{\text{eff}})}{\int \mathcal{D}(\beta, \bar{\beta}) \exp(-S_{\text{eff}})} \quad (98)$$

のように汎関数積分を用いて定義する ($\hbar = 1$ であることに注意)。ここで、新しく導入された場の変数 $(\beta_{\alpha p}, \bar{\beta}_{\alpha p})$ は演算子 $(\beta_{\alpha\mathbf{k}}, \beta_{\alpha\mathbf{k}}^\dagger)$ に対応した複素数に値を持つ場とその共役場であり、お互いに複素共役の関係 $\bar{\beta}_\alpha = (\beta_\alpha)^*$ で結ばれる。NG 分岐に関しても同様であり、演算子 $(\beta_{\varphi\mathbf{k}}, \beta_{\varphi\mathbf{k}}^\dagger)$ に対応する場を $(\beta_{\varphi p}, \bar{\beta}_{\varphi p})$ と定義する。場をラベルする添字 p は $p = (i\omega_n, \mathbf{k})$ 、 $\omega_n = 2\pi nT = 2\pi n/\beta$ は松原振動数、 T は温度、そして β は逆温度である。絶対零度を考える場合、離散的な松原振動数を連続的な変数に置き換えればよい。可能なすべての場の配位に対する確率的な重みは、有効模型 (95) を正規順序化した模型から求められる作用 S_{eff} を用いて $e^{-S_{\text{eff}}}$ で与えられる。この作用の具体的な表式は

$$S_{\text{eff}} = S_{\text{eff}}^{(2)} + S_{\text{eff}}^{(3)} + S'_{\text{eff}}{}^{(3)}, \quad (99)$$

$$S_{\text{eff}}^{(2)} = \sum_{m=(\alpha, \varphi)} \sum_p (-i\omega_n + \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^m) \bar{\beta}_{mp} \beta_{mp}, \quad (100)$$

$$S_{\text{eff}}^{(3)} = \frac{1}{2\sqrt{\beta}} \sum_{p_1, p_2, p_3} \mathcal{M}_{p_1, p_2, p_3} (\beta_{\alpha p_1} \bar{\beta}_{\varphi p_2} \bar{\beta}_{\varphi p_3} + \bar{\beta}_{\alpha p_1} \beta_{\varphi p_2} \beta_{\varphi p_3}), \quad (101)$$

$$S'_{\text{eff}}{}^{(3)} = \text{other terms} \quad (102)$$

である。ここで便宜上3次の相互作用項を二つの部分に分けた。 $S_{\text{eff}}^{(3)}$ は図8の(a)から(d)に対応した項(およびそれにエルミート共役な項)を持ち、他方 $S_{\text{eff}}^{(3)}$ は(e)に対応した項(およびそれにエルミート共役な項)を持つ。このように分割した理由は後で説明される。(101)式の係数行列 $\mathcal{M}_{p_1, p_2, p_3}$ は、Bogoliubov係数で用いて表され、

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{p_1, p_2, p_3} &= \frac{\delta_{\omega_1, \omega_2 + \omega_3} \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3}}{\sqrt{N}} \times \\ &\left[-J\bar{n}zu \sqrt{1 - u^2} \gamma_{\mathbf{k}_1} (u_{\alpha \mathbf{k}_1} + v_{\alpha \mathbf{k}_1}) (u_{\varphi \mathbf{k}_2} v_{\varphi \mathbf{k}_3} + v_{\varphi \mathbf{k}_2} u_{\varphi \mathbf{k}_3}) \right. \\ &\quad + \frac{J\bar{n}z}{2} \sqrt{1 - u^2} \gamma_{\mathbf{k}_2} (u_{\alpha \mathbf{k}_1} u_{\varphi \mathbf{k}_3} - v_{\alpha \mathbf{k}_1} v_{\varphi \mathbf{k}_3}) (u_{\varphi \mathbf{k}_2} - v_{\varphi \mathbf{k}_2}) \\ &\quad \left. + \frac{J\bar{n}z}{2} \sqrt{1 - u^2} \gamma_{\mathbf{k}_3} (u_{\alpha \mathbf{k}_1} u_{\varphi \mathbf{k}_2} - v_{\alpha \mathbf{k}_1} v_{\varphi \mathbf{k}_2}) (u_{\varphi \mathbf{k}_3} - v_{\varphi \mathbf{k}_3}) \right] \end{aligned} \quad (103)$$

$$\equiv \delta_{\omega_1, \omega_2 + \omega_3} \mathcal{M}_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} \quad (104)$$

$$\equiv \frac{\delta_{\omega_1, \omega_2 + \omega_3} \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3}}{\sqrt{N}} \mathcal{M}'_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} \quad (105)$$

である。 $\mathcal{M}_{p_1, p_2, p_3}$ は p_2 と p_3 について対称行列である。行列 $\mathcal{M}_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3}$ と $\mathcal{M}'_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3}$ は、後で出てくるいくつかの表式を簡潔に書き表すために導入された。

Higgsモードの自己エネルギー $\Sigma_{\alpha}(i\omega_n, \mathbf{k})$ は、1粒子Green's関数を用いて

$$\langle \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} \rangle = \langle \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} \rangle_0 + \langle \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} \rangle_0 \Sigma_{\alpha}(i\omega_n, \mathbf{k}) \langle \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} \rangle \quad (106)$$

で定義される。この方程式は場の理論の文脈ではDyson方程式と呼ばれる。ここで $\langle \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} \rangle_0$ は非摂動作用 $S_{\text{eff}}^{(2)}$ に関する1粒子Green's関数であり、その具体的な関数形は

$$\langle \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} \rangle_0 = -\frac{1}{i\omega_n - \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{\alpha}} \quad (107)$$

で与えられる。これは相互作用による擾乱を受けずに伝搬する自由なHiggsモードを表す。NGモードに対しても同様であり、自由に伝搬するNGモードの1粒子Green's関数は

$$\langle \beta_{\varphi p} \bar{\beta}_{\varphi p} \rangle_0 = -\frac{1}{i\omega_n - \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{\varphi}} \quad (108)$$

で与えられる。Higgsモードの自己エネルギーは、Higgsモードに対応する線を両端に持つ、Higgs内線の一つ切断しただけでは二つの部分に分割できないという意味で既約なFeynmanダイアグラムの総和である。その各々が自己エネルギーへの寄与を与える。

自己エネルギーを摂動論を用いて計算することを考えよう。摂動論による自己エネルギーの計算は、 $S_{\text{eff}}^{(2)}$ を非摂動項としたときの摂動項 $S_{\text{eff}}^{(3)} + S_{\text{eff}}^{\prime(3)}$ に関して2次までの摂動展開をし、二つの相互作用項を用いて構成されるすべての可能なFeynmanダイアグラムに対応した部分的な寄与を計算することで行われる。しかし、後でわかるように、 $S_{\text{eff}}^{\prime(3)}$ を用いて構成されるFeynmanダイアグラムからの実際の寄与は存在しないため、今の目的のためにはこれを無視しても良い。そこで以下では、図8(e)に対応した $S_{\text{eff}}^{(3)}$ のみを考慮し、それ以外の相互作用項 $S_{\text{eff}}^{\prime(3)}$ を無視して自己エネ

ルギーの計算を行うことにする。(98) 式を、 $S_{\text{eff}}^{(3)}$ に関して摂動展開すると、

$$\begin{aligned} \langle \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} \rangle &= \frac{\int \mathcal{D}(\beta, \bar{\beta}) \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} (1 - S_{\text{eff}}^{(3)} + \frac{1}{2!} (S_{\text{eff}}^{(3)})^2 + \dots) \exp(-S_{\text{eff}}^{(2)})}{\int \mathcal{D}(\beta, \bar{\beta}) (1 - S_{\text{eff}}^{(3)} + \frac{1}{2!} (S_{\text{eff}}^{(3)})^2 + \dots) \exp(-S_{\text{eff}}^{(2)})} \\ &= \frac{\langle \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} \rangle_0 - \langle \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} S_{\text{eff}}^{(3)} \rangle_0 + \frac{1}{2!} \langle \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} (S_{\text{eff}}^{(3)})^2 \rangle_0 \dots}{1 - \langle S_{\text{eff}}^{(3)} \rangle_0 + \frac{1}{2!} \langle (S_{\text{eff}}^{(3)})^2 \rangle_0 + \dots} \end{aligned}$$

となる。分母は真空中に生じるバブルを表す。分子は $\langle \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} \beta_{\alpha p_1} \bar{\beta}_{\alpha p_2} \bar{\beta}_{\alpha p_3} \dots \rangle_0$ のような場について 5 次、8 次、11 次、... の積の $e^{-S_{\text{eff}}^{(2)}}$ に関する平均を含み、このうち生成演算子と消滅演算子を同数含まない項はゼロとなる。例えば、奇数次の項はすべてゼロとなる。ゼロにならない偶数次の平均は、よく知られた Wick の定理を用いて自由な伝搬関数 (107) と (108) の積に書き表すことができ、そうして得られたそれぞれの項は外線を持つ Feynman ダイアグラムに対応づけられる。これらのダイアグラムには、二つ以上の部分に完全に分離しているものと、少なくとも一つの内線で連結しているものの二種類が存在する。分離する二つ以上の部分を持つすべてのダイアグラムを、その構成要素が外線につながったダイアグラムだけ見れば同じグループに属するようなダイアグラムからなる部分和を足し上げたものと見なすと、これを外線を持つ連結ダイアグラムと真空中のバブルの総和の積の形に書き表すことができる。バブルの因子は分母により約されるので、結局 $\langle \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} \rangle$ は連結する Feynman ダイアグラムのみを用いて

$$\langle \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} \rangle = \langle \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} \rangle_0 + \frac{1}{2!} \langle \beta_{\alpha p} \bar{\beta}_{\alpha p} (S_{\text{eff}}^{(3)})^2 \rangle_0^c + \dots \quad (109)$$

のように書き表されることがわかる。ここで右辺第 2 項に記された記号 c は Wick の定理による可能な縮約のうち連結ダイアグラムのみを考慮することを意味する。(109) 式の右辺第 2 項を Wick の定理を用いて実際に計算すると、Higgs モードの自己エネルギーに対する最低次の寄与を含んだ表式として

$$\Sigma_{\alpha}(i\omega_n, \mathbf{k}) = \frac{1}{2\beta} \sum_{p_1} \sum_{p_2} |M_{p_1, p_2}|^2 \langle \beta_{\alpha p_1} \bar{\beta}_{\alpha p_1} \rangle_0 \langle \beta_{\alpha p_2} \bar{\beta}_{\alpha p_2} \rangle_0 \quad (110)$$

を得る。この表式はちょうど図 9 に示したような Feynman ダイアグラムに対応しており、物理的には Higgs モードが二つの NG モードに崩壊する過程により減衰率が有限になることを意味する。このように、一つの集団励起モードが別の二つの集団励起モードへの崩壊により減衰することを Beliaev 減衰と呼ぶ [67, 68]。



図 9: Higgs モードの自己エネルギーへの寄与を表す Feynman 図。実線は Higgs モードの自由な伝搬を表し、 $\langle \beta_{\alpha} \bar{\beta}_{\alpha} \rangle_0$ に対応する。一方で、破線は NG モードの自由な伝搬を表し、 $\langle \beta_{\varphi} \bar{\beta}_{\varphi} \rangle_0$ に対応する。

自己エネルギー (110) から Higgs モードの減衰率を計算しよう。(110) 式は、恒等式

$$\sum_{\omega_{n_1}} \sum_{\omega_{n_2}} \delta_{\omega_n, \omega_{n_1} + \omega_{n_2}} \frac{1}{i\omega_{n_1} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^\varphi} \frac{1}{i\omega_{n_2} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi} = -\beta \frac{1 + f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^\varphi) + f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi)}{i\omega_n - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^\varphi - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi} \quad (111)$$

を用いることで、次のように書き直すことができる。

$$\Sigma_\alpha(i\omega_n, \mathbf{k}) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} |\mathcal{M}_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}|^2 \frac{1 + f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^\varphi) + f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi)}{i\omega_n - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^\varphi - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi} \quad (112)$$

ここで、 $f_B(z)$ は Bose 分布関数

$$f_B(z) = \frac{1}{e^{\beta z} - 1} \quad (113)$$

である。(112) 式を $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$ のように解析接続すると、Higgs モードの遅延 Green's 関数に対する自己エネルギー

$$\begin{aligned} \Sigma_\alpha^R(\omega, \mathbf{k}) &\equiv \Sigma_\alpha(i\omega_n, \mathbf{k})|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} |\mathcal{M}_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}|^2 \frac{1 + f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^\varphi) + f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi)}{\omega - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^\varphi - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi + i\delta} \end{aligned} \quad (114)$$

を得る。Higgs モードの減衰率は、 $\omega = \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\alpha$ としたときの自己エネルギー (114) の虚部

$$\Gamma_{\alpha\mathbf{k}} = \text{Im}\Sigma_\alpha^R(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\alpha, \mathbf{k}) \quad (115)$$

であるので、これを計算すると結局、Higgs モードの減衰率として

$$\Gamma_{\alpha\mathbf{k}} = \frac{\pi}{2} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} |\mathcal{M}_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}|^2 (1 + f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^\varphi) + f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi)) \delta(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\alpha - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^\varphi - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi) \quad (116)$$

を得る。(116) 式は分布関数 $f_B(z)$ を介して温度に依存する。もし (116) 式に含まれる δ 関数がすべての波数にわたって少なくとも一点でゼロでないならば、減衰率の値がゼロとならないことがわかる。これは Beliaev 減衰の特徴の一つである。つまり、Higgs モードは絶対零度において、二つの NG モードを放出することで減衰しうる [29]。後で見るように、(116) 式に含まれる δ 関数は実際にゼロでない値を与えるので、絶対零度において Higgs モードはゼロでない減衰率を持つことがわかる。

(116) 式は、始状態から中間状態への遷移に対するエネルギー保存則を意味する δ 関数を含んでいる。これは、相互作用に関わる 3 つの準粒子のもつエネルギーがバンド構造 (96) から与えられるという意味で、on-shell のエネルギー保存則である。保存則の形は、ダイアグラムを構成する頂点の種類に対応する。もし図 8(a) から図 8(d) までの相互作用項を考慮に入れ、上記と同様の計算を行い減衰率に対する表式を求めたとすると、やはりその表式は on-shell のエネルギー保存則に対応した δ 関数を含む。もしバンド構造の理由からこの保存則を満たすような波数の組が存在しないならば、減衰率への実際的な寄与はゼロである。実際に数値的な方法を用いて確かめてみればわかるように、図 8(e) に対応した保存則のみが解を持ち、それ以外の場合に対応した保存則は解

を持たないことがわかる。もしバンド構造が (97) 式のような簡単な形を持つならば、この事実は解析的に確かめることができる。先の議論で図 8(a) から図 8(d) までの相互作用項を無視したことはこの事実に由来する。NG モードの場合の計算においても、同様の理由により図 8(e) のみを考慮して計算を行うことにする。

3.5.2 Nambu–Goldstone モードの自己エネルギー

Higgs モードのときと全く同様にして、NG モードの自己エネルギー、そして減衰率を計算することができる。計算の出発点は NG モードの 1 粒子 Green's 関数

$$\langle \beta_{\varphi p} \bar{\beta}_{\varphi p} \rangle \equiv \frac{\int \mathcal{D}(\beta, \bar{\beta}) \beta_{\varphi p} \bar{\beta}_{\varphi p} \exp(-S_{\text{eff}})}{\int \mathcal{D}(\beta, \bar{\beta}) \exp(-S_{\text{eff}})} \quad (117)$$

である。有効作用は (99) 式で与えられ、3.5.1 節で説明したように、摂動項のうち $S_{\text{eff}}^{(3)}$ のみを考慮する。 $S_{\text{eff}}^{(3)}$ に関して 2 次のオーダーで摂動展開すると、

$$\langle \beta_{\varphi p} \bar{\beta}_{\varphi p} \rangle = \langle \beta_{\varphi p} \bar{\beta}_{\varphi p} \rangle_0 + \frac{1}{2!} \langle \beta_{\varphi p} \bar{\beta}_{\varphi p} (S_{\text{eff}}^{(3)})^2 \rangle_0 + \dots \quad (118)$$

である。NG モードに関する Dyson 方程式

$$\langle \beta_{\varphi p} \bar{\beta}_{\varphi p} \rangle = \langle \beta_{\varphi p} \bar{\beta}_{\varphi p} \rangle_0 + \langle \beta_{\varphi p} \bar{\beta}_{\varphi p} \rangle_0 \Sigma_{\varphi}(i\omega_n, \mathbf{k}) \langle \beta_{\varphi p} \bar{\beta}_{\varphi p} \rangle \quad (119)$$

が定義する NG モードの自己エネルギーは、Green's 関数 (117) に含まれる、2 本の NG モードの外線とつながり、かつそれ自身 1 本の NG モードの内線の切断により二つの部分に分割できないようなダイアグラムの総和である。したがって、そのような部分を 2 次のオーダーまでの範囲内で (118) 式から取り出すと、NG モードの自己エネルギーは

$$\Sigma_{\varphi}(i\omega_n, \mathbf{k}) = \frac{1}{\beta} \sum_{p_1} \sum_{p_2} |\mathcal{M}_{p_1, p, p_2}|^2 \langle \beta_{\alpha p_1} \bar{\beta}_{\alpha p_1} \rangle_0 \langle \beta_{\varphi p_2} \bar{\beta}_{\varphi p_2} \rangle_0 \quad (120)$$

で与えられることがわかる。この表式はちょうど図 10 に示したような Feynman ダイアグラムに対応している。このダイアグラムは、始状態における一つの NG モードが熱的に励起された他の NG モードを吸収し、新しく一つの Higgs モードを励起することで消滅する過程により、NG モードの減衰率が有限になることを意味する。熱励起の吸収とその結果としての新しい集団励起の生成に伴う集団励起モードの減衰を Landau 減衰と呼ぶ。このような減衰現象は、無衝突プラズマの問題において、Landau によって最初に議論された [48, 69]。

次に (120) 式から減衰率に対する表式を求めよう。次の恒等式

$$\sum_{\omega_{n_1}} \sum_{\omega_{n_2}} \delta_{\omega_{n_1}, \omega_n + \omega_{n_2}} \frac{1}{i\omega_{n_1} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^{\alpha}} \frac{1}{i\omega_{n_2} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^{\varphi}} = -\beta \frac{f_{\text{B}}(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^{\varphi}) - f_{\text{B}}(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^{\alpha})}{i\omega_n - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^{\alpha} + \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^{\varphi}} \quad (121)$$

を用いると、(120) 式は、

$$\Sigma_{\alpha}(i\omega_n, \mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} |\mathcal{M}_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}, \mathbf{k}_2}|^2 \frac{f_{\text{B}}(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^{\varphi}) - f_{\text{B}}(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^{\alpha})}{i\omega_n - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^{\alpha} + \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^{\varphi}} \quad (122)$$



図 10: NG モードの自己エネルギーへの寄与を表す Feynman 図。実線は Higgs モードの自由な伝搬を表し、 $\langle \beta_\alpha \bar{\beta}_\alpha \rangle_0$ に対応する。一方で、破線は NG モードの自由な伝搬を表し、 $\langle \beta_\phi \bar{\beta}_\phi \rangle_0$ に対応する。

と書き換えられる。(122) 式の解析接続から遅延 Green's 関数の自己エネルギー

$$\begin{aligned} \Sigma_\phi^R(\omega, \mathbf{k}) &\equiv \Sigma_\phi(i\omega_n, \mathbf{k})|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta} \\ &= - \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} |\mathcal{M}_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}, \mathbf{k}_2}|^2 \frac{f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\phi) - f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^\alpha)}{\omega - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^\alpha + \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\phi + i\delta} \end{aligned} \quad (123)$$

を求めることができる。 $f_B(z)$ は (113) 式で与えた Bose 分布関数である。Higgs モードと同様、NG モードの減衰率は

$$\Gamma_{\phi\mathbf{k}} = \text{Im} \Sigma_\phi^R(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\phi, \mathbf{k}) \quad (124)$$

で定義されるので、結局、NG モードの減衰率に対する表式として

$$\Gamma_{\phi\mathbf{k}} = \pi \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} |\mathcal{M}_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}, \mathbf{k}_2}|^2 (f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\phi) - f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^\alpha)) \delta(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\phi - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^\alpha + \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\phi) \quad (125)$$

を得る。この表式は明らかに絶対零度 $\beta \rightarrow \infty$ においてゼロであり、したがって Landau 減衰の寄与が有限温度の系においてのみ存在することがわかる。つまり、絶対零度においては NG モードが衝突する熱励起が存在しないので、減衰は起こらないのである。これは Landau 減衰の特徴の一つであり、3.5.1 節での Beliaev 減衰とは対照的である。

3.5.1 節から 3.5.2 節までの議論をまとめよう。Higgs モードと NG モードの各々に対して有限温度における減衰率の表式を得た。Higgs モードの減衰率への寄与は、Beliaev 型のダイアグラムのみであり、絶対零度においても有限の寄与を持ちうる。一方で NG モードへの減衰率への寄与は、Landau 型のダイアグラムのみであり、絶対零度においてそれはゼロとなる。以降の章では、これらの減衰率の u 依存性と T 依存性を、解析的および数値的な方法で調べる。具体的には、それぞれの表式に含まれる運動量に関する総和を評価する。

4 Higgs モードの減衰率

この章では、3.5.1 節で求めた Higgs モードの減衰率の公式 (116) を用いて、有限温度における Higgs モードの減衰の性質を議論する。NG モードの議論は第 5 章で展開される。4.1 節では、表式 (116) を長波長近似の範囲内で解析的に評価し、得られた表式を用いて減衰の性質を議論する。4.2 節では、長波長近似をとらない数値的な方法で評価した結果を示し、4.1 節における結果との相違点を議論する。

4.1 長波長近似を用いた解析的な評価

この節では、Higgs モードの減衰率 (116) がもつ運動量に関する総和を積分で近似し、その積分を解析的に実行することで、減衰率に対する具体的な関数形を求める。以下では運動量 $\mathbf{k} = 0$ をもつ Higgs モードの減衰率を考察する (図 11 参照)。波数ゼロの Higgs モードに着目する理由は、まず実験的には長波長的な固有振動モードの方が生成しやすいこと、そして波数ゼロを持つ Higgs モードの性質が実験系において観測可能な Higgs ギャップの性質に関わることから特に重要だからである (第 1 章を参照)。求められた表式の u 依存性と T 依存性を調べることで、Higgs モードの減衰の性質を理解する。

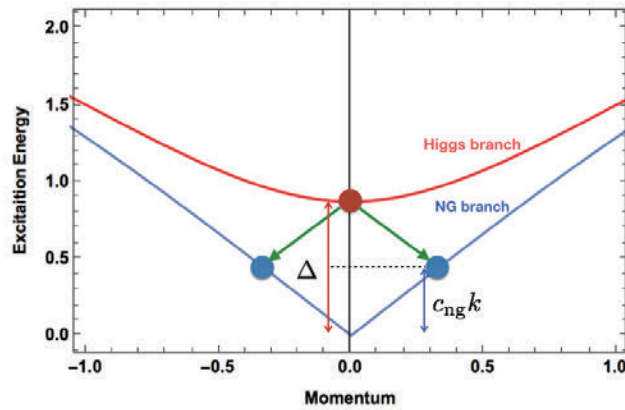


図 11: ゼロ運動量を持つ Higgs モードの減衰の概念図。Higgs モードは二つの NG モードに崩壊することで減衰する。それぞれの NG モードは、エネルギー・運動量保存則より、Higgs ギャップの半分に等しいエネルギーを持ち、お互いに逆向きの運動量を持つ。

初めに、運動量空間にわたる被総和関数の変動が十分に滑らかであると仮定して、(116) 式の運動量に関する総和を次のような積分で近似しよう。

$$\begin{aligned} \Gamma_{\alpha\mathbf{k}} &= \frac{\pi}{2} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} |\mathcal{M}_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}|^2 (1 + f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^\varphi) + f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi)) \delta(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\alpha - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^\varphi - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi) \\ &\approx \frac{\pi}{2} \int_{|\mathbf{k}_2| < k_c} \frac{d^3 k_2}{(2\pi)^3} |\mathcal{M}'_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_2}|^2 (1 + f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_2}^\varphi) + f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi)) \delta(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\alpha - \mathcal{E}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_2}^\varphi - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi). \end{aligned} \quad (126)$$

ただし、積分は高エネルギー領域を消去するために導入されたカットオフ $k_c \sim (\text{格子定数})^{-1} = 1$ を持つ。被積分関数の形から明らかに、この積分を解析的に実行することは困難である。

そこで積分を解析的に評価するために、相互作用過程が長波長領域で閉じると仮定して、表式 (126) に対して長波長近似を行おう。つまり、被積分関数が持つすべての Bogoliubov 変換 (86) の

係数 (92) および (93) を

$$u_{\alpha\mathbf{k}} \approx \sqrt{\frac{2-u^2+\Delta}{2\Delta}} + O(|\mathbf{k}|^2), \quad (127)$$

$$v_{\alpha\mathbf{k}} \approx \sqrt{\frac{2-u^2-\Delta}{2\Delta}} + O(|\mathbf{k}|^2), \quad (128)$$

$$u_{\varphi\mathbf{k}} \approx \sqrt{\frac{u+1}{4c_{\text{ng}}|\mathbf{k}|}} \left(1 + \frac{c_{\text{ng}}|\mathbf{k}|}{u+1} + O(|\mathbf{k}|^2) \right), \quad (129)$$

$$v_{\varphi\mathbf{k}} \approx -\sqrt{\frac{u+1}{4c_{\text{ng}}|\mathbf{k}|}} \left(1 - \frac{c_{\text{ng}}|\mathbf{k}|}{u+1} + O(|\mathbf{k}|^2) \right) \quad (130)$$

のように近似し、異方的なバンド分散 (96) を等方的な (97) 式で近似しよう。このような仮定は、特に Mott 転移点近傍において正当化される。なぜならば、転移点近傍においては、減衰率の振る舞いに対してエネルギー・運動量保存則の観点から $\Delta/(2c_{\text{ng}})$ 程度の波数を持つ NG モードが支配的だからである。つまり、ちょうど Higgs ギャップの半分程度のエネルギーをもつ NG モードが支配的である (図 11 を参照)。転移点近傍では $\Delta/(2c_{\text{ng}}) \ll 1$ であるので、このような長波長近似が有効である。もちろん、 $\Delta/(2c_{\text{ng}}) \ll 1$ が満足されない領域では、先験的には長波長近似は有効でないと考えられる。これに関しては次の節において再び考察する。

上で述べた長波長近似を行うと、(116) 式は

$$\Gamma_{\alpha\mathbf{k}=0} = \frac{\pi(1+u)^4(1-u^2)}{4\Delta c_{\text{ng}}^2} \int_{|\mathbf{k}_2| < k_c} \frac{d^3k_2}{(2\pi)^3 |\mathbf{k}_2|^2} (1 + 2f_{\text{B}}(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^{\varphi})) \delta(\mathcal{E}_0^{\alpha} - 2\mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^{\varphi}) \quad (131)$$

なる形に書き直される。もし u が Mott 転移点に十分に近く、支配的な NG モードが持つ波数 $\Delta/(2c_{\text{ng}})$ が十分に小さいならば、 k_c を無限大としても結果に重要な違いを与えない。つまり、

$$\begin{aligned} \int_{|\mathbf{k}_2| < k_c} d^3k_2 &\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dk_2^x dk_2^y dk_2^z \\ &= 2\pi \int_0^{\infty} d|\mathbf{k}_2| \int_{-1}^1 d(\cos\theta) |\mathbf{k}_2|^2 \end{aligned} \quad (132)$$

のように置き換えてもよい。 $|\mathbf{k}_2|$ と $\cos\theta$ に関する積分は $\delta(\mathcal{E}_0^{\alpha} - 2\mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^{\varphi}) = \delta(k_2 - \Delta/(2c_{\text{ng}}))/(2c_{\text{ng}})$ に注意すれば簡単に計算できて、その結果は

$$\Gamma_{\alpha\mathbf{k}=0} = J\bar{n}z \frac{d^{3/2}(1+u)\sqrt{1-u^2}}{2^3\sqrt{2}\pi} \coth\frac{\beta\Delta}{4} \quad (133)$$

である。ここで $d=3$ である。この表式が主要な結果の一つであり、有限温度における Higgs モードの Beliaev 減衰による減衰率を与える。Higgs ギャップを有限に保ちつつ、 $\beta\Delta \rightarrow \infty$ の極限をとることで、絶対零度における Higgs モードの減衰率

$$\lim_{\beta\Delta \rightarrow \infty} \Gamma_{\alpha\mathbf{k}=0} = J\bar{n}z \frac{d^{3/2}(1+u)\sqrt{1-u^2}}{2^3\sqrt{2}\pi} \quad (134)$$

を得る。(133) 式と (134) 式の比較からわかるように、絶対零度における減衰率に対する有限温度補正効果は $\coth(\beta\Delta/4)$ の因子に集約されている。(134) 式の転移点近傍の振る舞いは、先行研究 [29]

の結論と一致する。つまり、(134) 式を Higgs ギャップで割った式は、転移点近傍において過減衰になる程大きな値をとることなく一定値へ近づく。その意味で、公式 (133) は先行研究 [29] の結果に対する有限温度補正効果を与える。

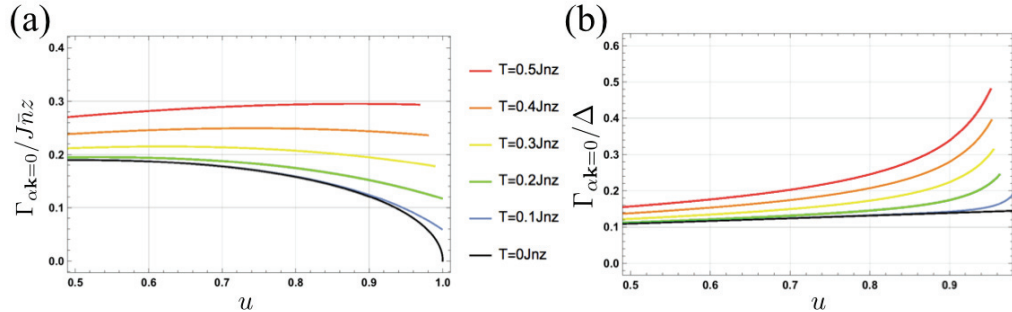


図 12: (a) $J\bar{n}z$ を単位としたときの Higgs モードの減衰率を、 T を固定し、横軸を u として示した。Higgs モードは転移点近傍において有限の減衰率を持ち、それは温度の増加に伴い増大する。(b) Δ に関する Higgs モードの減衰率の比を、 T を固定し、横軸を u として示した。 $T = 0.5J\bar{n}z$ において、それは 1 よりも小さい値を持つので、Higgs モードは過減衰ではないことがわかる。

減衰率 (133) および (134) は無次元量 $u = U/(4J\bar{n}z)$ に依存し、 $|1 - u|$ に依存してその大きさを変え、さらにその大きさは温度に依存する。その様子を図 12(a) に示した。図 12(a) からわかるように、Higgs モードの減衰率は、転移点に近づくにつれて、温度によって決まるある有限の値へ漸近する。減衰率の値は、温度が上昇するにつれて図 12(a) に示されるように増大する。これは転移点近傍において Higgs モードの共鳴ピークの崩れが有限温度効果により広がることを意味する。

ここで、有限温度効果により Higgs モードが過減衰になるかどうかを調べてみよう。Higgs モードの減衰特性は、Higgs モードの典型的な振動数 Δ に関する減衰率の比の大きさにより決まる。いま、 $\Gamma_{\alpha k}/\Delta \geq 1$ を満たすとき、Higgs モードは過減衰であると定義しよう。図 12(b) に、 $\Gamma_{\alpha k}/\Delta$ を u の関数として示した。温度を大きくするにつれて比 $\Gamma_{\alpha k}/\Delta$ が大きくなる振る舞いが見受けられるが、その大きさは 1 よりも小さい。したがって、およそ $J\bar{n}z \sim U$ 程度の温度では Higgs モードは依然として過減衰でないことがわかる。ここで、 $J\bar{n}z$ 程度の温度が現実の実験系の典型的な温度に相当することに注意しよう。よってこの結果は、典型的な実験系において、Higgs モードが過減衰でないことを意味し、3次元系において Higgs モードを well-defined なピークとして観測できる可能性を示唆する。

ここで、図 12(a) および (b) において、与えられた温度 T よりも Higgs ギャップ Δ が小さくなるような領域を消去したことに注意しよう。それは以下のような理由による：文献 [70] によれば、量子臨界点近傍において系の Higgs ギャップと超流動・常流動転移温度 T_c は

$$\Delta \sim |u - u_c|^{\frac{1}{2}}, \quad T_c \sim |u - u_c|^{\frac{1}{2}} \quad (135)$$

のようにスケールされる。つまり、Higgs ギャップ Δ と転移温度 T_c の臨界指数は一致し、 $\Delta \sim T_c$ となる。ところで、これまでの議論では、系が超流動状態にあることを暗黙のうちに仮定していた。もし T が Higgs ギャップよりも大きいならば、系が超流動状態にあることに反する。したがって、

T は Higgs ギャップより小さくなければならない。図 7 で示したように、Higgs ギャップは Mott 転移点に近づくにつれて閉じていくので、Mott 転移点 $u = 1$ に十分近づいたところで T と Δ の大小関係が逆転する。逆転する点を条件 $\Delta \equiv T$ により定めると、その点よりも転移点に近い側の結果は上に述べた理由で物理的ではないので除去しなければならないのである。

以上をまとめると、長波長近似を用いて減衰率に対する解析的表式 (133) を得た。表式 (133) の各温度における u 依存性から、超流動・常流動転移温度以下の典型的な実験系の温度において、Higgs モードは過減衰にならない程度の有限の減衰率を持つことがわかった。そしてその減衰率は温度の上昇に対して図 12 のように増加することがわかった。

4.2 数値的な評価

前節でも述べたように、解析的表式 (133) は長波長近似が妥当である領域においてのみ正しい。前節に述べた考察によれば、条件 $\Delta/(2c_{ng}) \ll 1$ が満たされる Mott 転移点近傍がそのような領域である。Mott 転移点から離れた領域では長波長近似が妥当でないことは次のようにして理解できる。図 13 に示すようなエネルギー・運動量保存則 $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{\alpha} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_2}^{\beta} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^{\gamma} = 0$ の数値解の集合を考察しよう。図 13(a) から (f) までの図に示された閉じた曲面のおよその半径は、Higgs モードの崩壊後にできる NG モードが持つべき波数の大きさに等しく、およそ $\Delta/(2c_{ng})$ である。Mott 相に十分近い図 13(f) においては、この大きさは十分に小さいので、長波長近似は妥当であると考えてよい。しかし、図 13(a) に向かうにつれてこの大きさは徐々に大きくなり、長波長近似は妥当でなくなる。

先験的には、このような領域においては長波長近似を用いて導かれた (133) 式は正しくない結果を与えるはずである。実際には長波長近似により無視された寄与があり、その寄与が (133) 式とは本質的に異なる振る舞いを減衰率に与える可能性がある。この節では、長波長近似を用いて導かれた (133) 式の適用範囲を理解するために、(116) 式の数値的な総和について考察する。得られた結果を解析的表式と比較することで、長波長近似がどの程度よいのか理解する。

数値的な総和を行うためには、表式 (116) がもつ δ 関数を適当な関数で置き換えなければならない。ここでは、そのような置き換えとして

$$\delta(x) \rightarrow \frac{1}{\pi\sqrt{\epsilon}} e^{-x^2/\epsilon^2} \quad (136)$$

を採用しよう。つまり、 δ 関数を Gauss 関数で置き換えることを考える。 ϵ は、ある有限の微小量であるとする。 ϵ は δ 関数の幅と高さの特徴付け、計算結果は ϵ と系のサイズ $L = N^{1/3}$ とに依存する。数値計算の結果がサイズの選び方や ϵ の選択に依存しない正しい出力を与えるように、最適な組 (ϵ, L) を選ぶ必要がある。そのような組を決めるためには、固定された $L = N^{1/3}$ に対する出力の ϵ 依存性を求め、 ϵ の値に関してある一定領域に広がった出力が変化しない範囲を見出し、その範囲に属する ϵ を選べば良い。そして、そのような出力が変化しない領域ができるだけ大きくなるような L を選べば良い。図 14 からわかるように、そのような組 (ϵ, L) として $(10^{-2}, 500)$ を選べば良い。以下に示すすべての結果はこのパラメータを用いて計算されたものである。

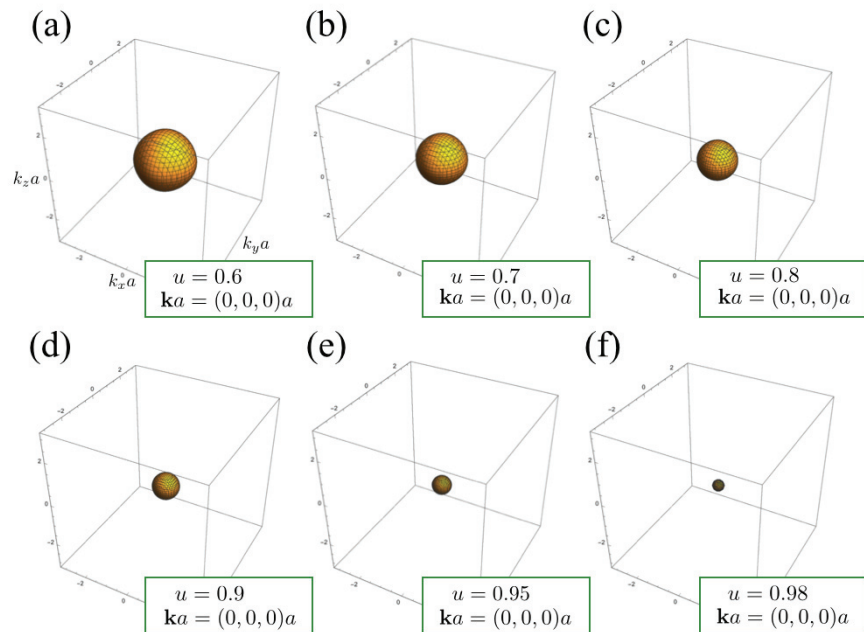


図 13: エネルギー・運動量保存則を数值的に解いて得られる解の集合。(a) から (f) に向かうにつれて u は 1 へ近づく。各図に示された閉じた曲面の差し渡しの半分は、Higgs モードが崩壊してできる NG モードが持つべき波数の大きさの程度である。これは転移点に近づく程小さくなる。

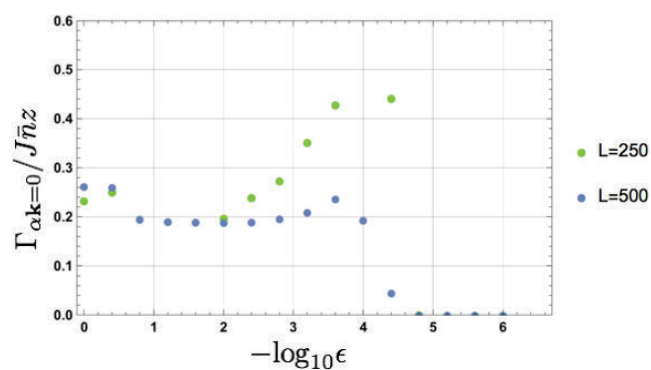


図 14: 数値計算結果の収束性の確認。 $L = 500$ において、およそ $\epsilon = 10^{-1}$ から $\epsilon = 10^{-2.5}$ の間に平坦な領域を見出すことができる。したがって、 $(L, \epsilon) = (500, 10^{-2})$ が最適なパラメータの組である。ここでは $(u, T) = (0.9, 0.3J\bar{n}z)$ に対する出力を計算した。

数値計算の結果を図 15 に示す。まず、 $T = 0.1J\bar{n}z$ でなおかつ転移点に十分近い領域を見てみよう。この領域においては、長波長近似を含む解析計算の結果と、そのような近似を含まない数値計算の結果がよく一致する。その一方で、転移点から離れたところにおいては、数値計算による結果の方が、解析的な結果よりも大きな減衰率を持つ。この違いは、長波長近似からのずれであり、Mott 転移点から離れた所では長波長近似が成り立たないことを意味する。しかしながら、この違いは減衰率のそのものの値に比べれば十分に小さく、したがって Mott 転移点から離れた所の減衰率の振る舞いも (133) 式でよく記述できることがわかる。

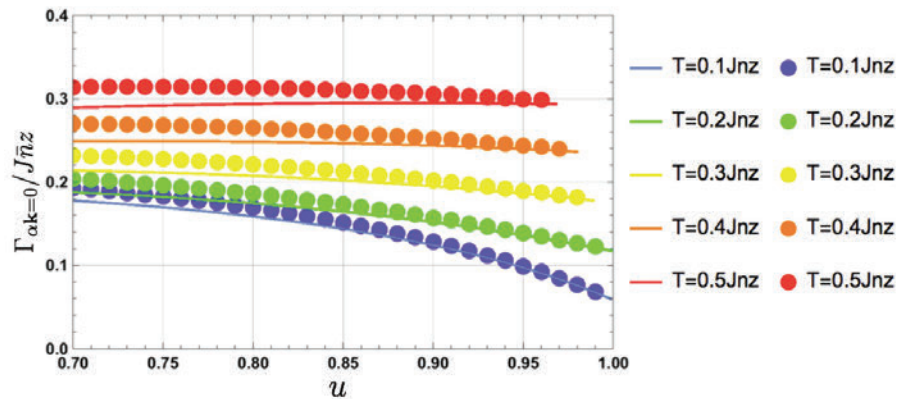


図 15: 数値計算の結果 (点線) と解析計算の結果 (実線) の比較。転移点近傍では両者は良い一致を示すが、その一方で転移点から離れた所では前者の方が後者よりも大きい。この差異は、長波長近似により無視されていた寄与である。

次に温度を高くした場合に同様の考察をしよう。Mott 転移点近傍においてはやはり数値計算と解析計算とでよい一致を示す。そして、転移点から離れた所においては、低温の場合と同様、数値計算の結果は解析計算の結果よりも大きい。しかし、低温の場合との違いは、その差の大きさの違いである。しかし、数値計算の結果 $\Gamma_{\alpha}^{\text{num}}$ と解析計算の結果 $\Gamma_{\alpha}^{\text{ana}}$ を用いて定義できる相対誤差 $|\Gamma_{\alpha}^{\text{num}} - \Gamma_{\alpha}^{\text{ana}}|/\Gamma_{\alpha}^{\text{num}}$ を導入すると、この相対誤差は温度によらず、お互いに同じオーダーの値を持つことがわかる。言い換えると、高温でずれが大きくなるのは、減衰率そのものが低温のときに比べて大きいからである。したがって、高温の場合にも (133) 式は Mott 転移点から離れた所の減衰率の主要な振る舞いを記述できることがわかる。

以上より、長波長近似が成り立たない領域における減衰率の振る舞いの主要な部分は、長波長近似で導いた解析的表式により記述されることがわかった。長波長近似が妥当でない領域において、数値計算の結果は解析計算の結果よりも大きいことがわかった。

5 Nambu–Goldstone モードの減衰率

この章では、3.5.2 節で求めた NG モードの減衰率の公式 (125) を用いて、有限温度における NG モードの減衰の性質を議論する。5.1 節では、Higgs モードのときと同様な方法で表式 (125) を長波長近似の範囲内で解析的に評価し、得られた表式を用いて減衰率の性質を議論する。5.2 節では、

長波長近似をとらない数値的な方法で評価した結果を示し、5.1節における結果との相違点を議論する。

5.1 長波長近似を用いた解析的な評価

この節では、第4章で Higgs モードの減衰率を調べたのと同様の方法で、NG モードの減衰率 (125) 式から具体的な関数形を求める。つまり、(125) 式における波数に関する総和を積分で近似し、その積分を長波長近似を用いて解析的に評価する。特に、その運動量の大きさが $|\mathbf{k}| \ll 1$ であるような長波長的な NG モードの減衰の性質に着目する。この理由は、Higgs モードのときと同様、このような NG モードは実験的に生成しやすいからである。

(132) 式と同じように総和を積分に置き換え、第4章における長波長近似を行うことで、(125) 式は、

$$\begin{aligned}
\Gamma_{\varphi\mathbf{k}} &\approx -\pi\beta \int_{|\mathbf{k}_2| < k_c} \frac{Nd^3k_2}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{(1+u)^4(1-u^2)}{4\beta N c_{\text{ng}}^2} \frac{2}{\sqrt{\Delta^2 + c_h^2|\mathbf{k} + \mathbf{k}_2|^2}} \frac{1}{|\mathbf{k}||\mathbf{k}_2|} \right\} \\
&\quad \times (f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_2}^\alpha) - f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi)) \delta(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\varphi - \mathcal{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_2}^\alpha + \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi) \\
&= -\pi\beta \int_{|\mathbf{k}_2| < k_c} \frac{Nd^3k_2}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{(1+u)^4(1-u^2)}{4\beta N c_{\text{ng}}^2} \frac{2}{c_{\text{ng}}(|\mathbf{k}| + |\mathbf{k}_2|)} \frac{1}{|\mathbf{k}||\mathbf{k}_2|} \right\} \\
&\quad \times (f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\varphi + \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi) - f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi)) \delta(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\varphi - \mathcal{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_2}^\alpha + \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi) \\
&= -\frac{2\pi(1+u)^4(1-u^2)}{4c_{\text{ng}}^3(2\pi)^3|\mathbf{k}|} \int_{|\mathbf{k}_2| < k_c} d^3k_2 \frac{1}{|\mathbf{k}_2|(|\mathbf{k}| + |\mathbf{k}_2|)} (f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\varphi + \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi) - f_B(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi)) \\
&\quad \times \delta(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\varphi - \mathcal{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_2}^\alpha + \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi)
\end{aligned} \tag{137}$$

のように近似できる。2つめの等号では δ 関数の性質を使い、最後の等号では定数因子を積分記号の前にまとめた。積分範囲は、Higgs モードのときと同じ理由で、その上端と下端を正の無限大と負の無限大に置き換えられる。

表式 (137) 式の積分を計算するために、 $f(x)$ を少なくとも一つの零点を持つ関数とし、その代表点を x_0 としたとき、 δ 関数が満たす関係式

$$\delta[f(x)] = \sum_{x_0} \frac{1}{|f'(x_0)|} \delta(x - x_0) \tag{138}$$

を用いて、 $\delta(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\varphi - \mathcal{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_2}^\alpha + \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi)$ を書き直そう。まず $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\varphi - \mathcal{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_2}^\alpha + \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^\varphi$ の零点が、 \mathbf{k} と \mathbf{k}_2 の間の角度を θ として、

$$c_{\text{ng}}(|\mathbf{k}| + |\mathbf{k}_2|) - \sqrt{\Delta^2 + c_h^2|\mathbf{k} + \mathbf{k}_2|^2} = 0 \tag{139}$$

で与えられる2次元平面 $(|\mathbf{k}_2|, \cos\theta)$ 内の曲線上の点であることに注意すると、この (139) 式の $|\mathbf{k}_2|$ を固定したときの $\cos\theta$ についての解

$$\cos\theta = \frac{c_{\text{ng}}^2(|\mathbf{k}| + |\mathbf{k}_2|)^2 - c_h^2(|\mathbf{k}|^2 + |\mathbf{k}_2|^2) - \Delta^2}{2c_h^2|\mathbf{k}||\mathbf{k}_2|} \tag{140}$$

$$\equiv g(|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}_2|; u) \tag{141}$$

を用いて、 $\delta(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{\varphi} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_2}^{\alpha} + \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^{\varphi})$ は

$$\delta(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{\varphi} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^{\alpha} + \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^{\varphi}) = \frac{c_{\text{ng}}(|\mathbf{k}| + |\mathbf{k}_2|)}{c_{\text{h}}^2|\mathbf{k}||\mathbf{k}_2|} \delta(\cos\theta - g(|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}_2|; u)) \quad (142)$$

のように書き直される。

(142) 式を用いて $\cos\theta$ に関する積分を実行するために、次の積分 $I(|\mathbf{k}|, u)$ を考察しよう：

$$I(|\mathbf{k}|, u) = \int_0^{\infty} d|\mathbf{k}_2| \int_{-1}^1 d(\cos\theta) f(|\mathbf{k}_2|, \cos\theta; u) \delta(\cos\theta - g(|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}_2|; u)) \quad (143)$$

$f(|\mathbf{k}_2|, \cos\theta; u)$ は任意の関数であるとする。 $|\mathbf{k}|$ と u が与えられたとき、 $|g(|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}_2|; u)| > 1$ となるような $|\mathbf{k}_2|$ に対しては、(143) 式の被積分関数はゼロとなる。いま $|\mathbf{k}| \ll 1$ であり、 $-|\mathbf{k}|^2 + \Delta^2/(c_{\text{ng}}^2 - c_{\text{h}}^2) > 0$ が成り立つので、任意の $|\mathbf{k}_2| > 0$ に対して $\partial g/\partial |\mathbf{k}_2| > 0$ であり、 $g(|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}_2|; u)$ は $|\mathbf{k}_2|$ の増大に関して単調増加関数である。実際、 $g(|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}_2|; u)$ の $|\mathbf{k}_2|$ に関する導関数は

$$\frac{\partial g(|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}_2|; u)}{\partial |\mathbf{k}_2|} = \frac{c_{\text{ng}}^2 - c_{\text{h}}^2}{2c_{\text{h}}^2|\mathbf{k}||\mathbf{k}_2|^2} \left(|\mathbf{k}_2|^2 - |\mathbf{k}|^2 + \frac{\Delta^2}{c_{\text{ng}}^2 - c_{\text{h}}^2} \right) \quad (144)$$

であり、その形からこれは明らかである。したがって、負の無限大から正の無限大へわたる $|\mathbf{k}_2|$ に関する積分 $I(|\mathbf{k}|, u)$ は、 $g(|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}_2|; u) = -1$ より定まる下端 k_l から $g(|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}_2|; u) = 1$ の条件より定まる上端 k_u へわたる $|\mathbf{k}_2|$ に関する積分となる。つまり、

$$I(|\mathbf{k}|, u) = \int_{k_l}^{k_u} d|\mathbf{k}_2| f(|\mathbf{k}_2|, g(|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}_2|; u)) \quad (145)$$

となる。ここで k_u と k_l は

$$k_u = -|\mathbf{k}| + \sqrt{\frac{\Delta^2}{c_{\text{ng}}^2 - c_{\text{h}}^2}}, \quad (146)$$

$$k_l = \frac{1}{c_{\text{ng}}^2 - c_{\text{h}}^2} \left\{ -(c_{\text{ng}}^2 + c_{\text{h}}^2)|\mathbf{k}| + \sqrt{4c_{\text{h}}^2c_{\text{ng}}^2|\mathbf{k}|^2 + \Delta^2(c_{\text{ng}}^2 - c_{\text{h}}^2)} \right\} \quad (147)$$

であり、 u の関数である。 k_u と k_l の大小関係は、もし長波長領域を考えるならば常に $k_u - k_l > 0$ である。実際、図 16(b) に示した $|\mathbf{k}| = 0.1$ のときの $k_u - k_l$ からわかるように、 u の全領域にわたり $k_u - k_l > 0$ が成り立つ。また図 16(a) からわかるように、下端 k_l は転移点直上においてちょうどゼロとなる。ここで、下端 k_l が 1 よりも小さくなる領域がおよそ $u = 0.95$ から $u = 1$ までの間にあることに注目しよう。この事実は長波長近似が妥当な領域が非常に狭いことを示す。したがって、以下で導く解析的な表式の結論は、この程度の狭い領域でしか成り立たないことに注意しよう。この問題には、次の数値計算に関する章において立ち返る。

(145) 式より (137) 式は

$$\Gamma_{\varphi\mathbf{k}} = -\frac{(1+u)^4(1-u^2)}{8\pi c_{\text{ng}}^2 c_{\text{h}}^2 |\mathbf{k}|^2} \int_{k_l}^{k_u} d|\mathbf{k}_2| (f_{\text{B}}(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{\varphi} + \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^{\varphi}) - f_{\text{B}}(\mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^{\varphi})) \quad (148)$$

となる。分布関数の積分は次の公式

$$\int dx \frac{1}{e^{\alpha_1 + \alpha_2 x} - 1} = \frac{1}{\alpha_2} \log(e^{\alpha_1} - e^{-\alpha_2 x}) + \text{const.} \quad (149)$$

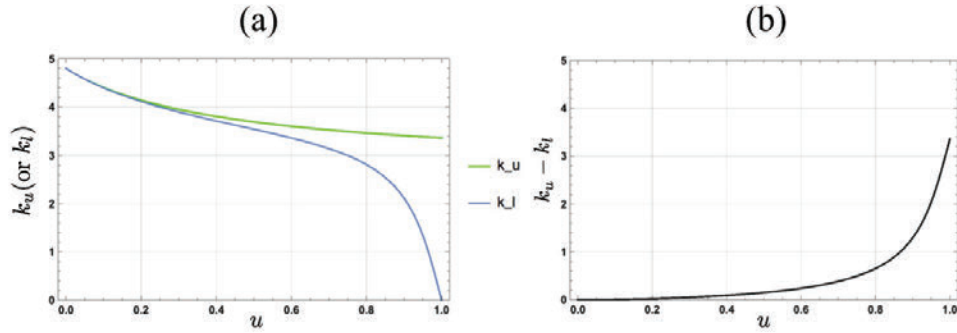


図 16: (a) k_u と k_l の u に関する依存性を示す。 $|\mathbf{k}| = 0.1$ であるとする。 $u = 1$ において、 k_l がゼロになることがわかる。(b) $|\mathbf{k}| = 0.1$ としたとき、 k_u と k_l の差は u に関して非負である。

より計算できる。結局、NG モードの減衰率として、次の表式を得る。

$$\Gamma_{\varphi\mathbf{k}} = \frac{d^{5/2}(1+u)^2(1-u)}{4\beta\sqrt{2}\pi u^2|\mathbf{k}|^2} \log \frac{1 - e^{-\beta c_{\text{ng}}(k_l + |\mathbf{k}|)}}{1 - e^{-\beta c_{\text{ng}}(k_u + |\mathbf{k}|)}} \frac{1 - e^{-\beta c_{\text{ng}}k_u}}{1 - e^{-\beta c_{\text{ng}}k_l}} \quad (150)$$

ここで空間次元は $d = 3$ である。この表式は明らかに $\beta \rightarrow \infty$ でゼロとなる。これは、絶対零度の極限では熱的に励起された NG モードが存在しないからである。

(150) 式は図 16 からわかるように、 k_u が 1 に比べて大きいこと、そして k が 1 に比べて小さいことから、さらに簡単な表式に書き直すことができ、

$$\Gamma_{\varphi\mathbf{k}} \approx \frac{d^{5/2}(1+u)^2(1-u)}{4\sqrt{2}\pi u^2|\mathbf{k}|} c_{\text{ng}} f_B(c_{\text{ng}}k_l) \quad (151)$$

である。 $|\mathbf{k}|$ が十分に小さいときの減衰率の温度依存性は、保存則により許容される下限の運動量 k_l を持つ NG モードに関する Bose 分布関数により記述されることがわかる。

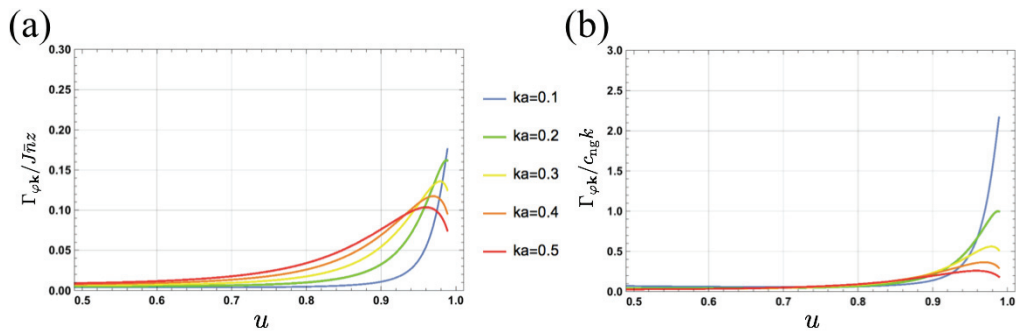


図 17: (a) NG モードの減衰率に対する解析的表式 (150) の u 依存性。温度は $T = 0.3J\bar{n}_z$ である。 u が転移点に近づくにつれて、減衰率はゼロから有限の値に立ち上がる。(b) NG モードがもつ振動数 $c_{\text{ng}}|\mathbf{k}|$ に関する (150) 式の比。転移点近傍において $\Gamma_{\varphi\mathbf{k}}/(c_{\text{ng}}|\mathbf{k}|)$ は非常に大きな値を持ち、したがって NG モードは過減衰である。(a) と (b) の双方において、Higgs ギャップ Δ が与えられた温度を下回る部分を消去してある (第 4 章を参照)。

(150) 式を T と $|\mathbf{k}|$ を固定して u に関してプロットすることによりその振る舞いを理解しよう。図 17(a) には温度を $T = 0.3J\bar{n}_z$ に固定し、運動量の大きさ $|\mathbf{k}|$ を図中に示すように変化させた時の振

る舞いを示した。まずは運動量の大きさによらずに共通する性質に言及しよう。図 17(a) からわかるように、NG モードの減衰率は、Mott 絶縁相への相転移点から十分にはなれた所では小さな値を持つが、そこから転移点に近づくにつれて徐々に増大する。つまり、Mott 転移点近傍においては、NG モードは大きな遷移確率で減衰することがわかる。

このような振る舞いは、次のように物理的に解釈できる。図 18 に示されるような二つの場合を考えよう。図 18(a) は転移点から十分にはなれた所での Higgs 分岐の分散関係と NG 分岐の分散関係であり、図 18(b) は十分に近いときの分散関係である。今、そのエネルギーが (b) においてちょうど Higgs ギャップの大きさの半分に等しいような運動量 \mathbf{k} を持つ NG モードが一つ存在する有限温度系を考えよう。この NG モードの減衰は、熱的に励起された他の NG モードを吸収し、終状態として Higgs モードを作り出すことで起こる (Landau 減衰)。容易にわかるように、Higgs 分岐のエネルギー・ギャップが (a) のように十分に開いているとき、エネルギー・運動量保存則からこのような吸収と放出は起こらないので、Landau 減衰は起きない。一方で、系を転移点に近づけることでエネルギー・ギャップを小さくして (a) から (b) に至ると、エネルギー・運動量保存則を満たすような散乱過程が現れ、Landau 減衰が起きるようになる。これが図 17(a) に示された NG モードの減衰率の振る舞いの物理的描像である。

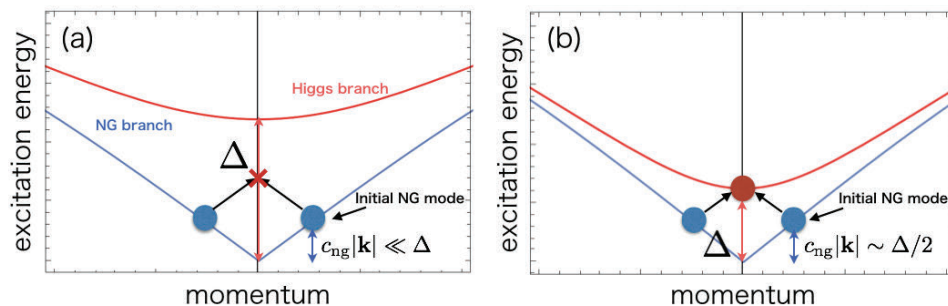


図 18: (a) Higgs ギャップが $c_{ng}|\mathbf{k}|$ に比べて十分に大きいとき、熱的に励起された NG モードを吸収することで上部にある Higgs バンドに遷移できないため、Landau 減衰は起こらない。(b) Higgs ギャップの大きさが、およそ $c_{ng}|\mathbf{k}|$ の 2 倍程度になったとき、上部の Higgs バンドへの遷移が可能となり、Landau 減衰が起こるようになる。

次に、運動量の大きさを変えたときの振る舞いについて言及しよう。 $|\mathbf{k}| = 0.1$ のとき、NG モードの減衰率は Mott 転移点近傍近くにピークを持つような構造を持つが、 $|\mathbf{k}|$ をそれよりも大きくするにつれて、そのピークは中心の位置を変えながら徐々に広がる。つまり、短波長領域から長波長領域に近づけるにつれて、減衰率が増大することがわかる。このような振る舞いの起源は次のように理解できる。大きな $|\mathbf{k}|$ を持つ NG モードは、大きなエネルギーを持つので、Higgs ギャップがあまり低い所まで落ちてこなくても、保存則を満足しながら Landau 減衰を起こすことができるのである。このような振る舞いは、長波長領域において NG モードが過減衰になる可能性を与える。これを確かめるために $T = 0.3J\tilde{n}z$ のときの $\Gamma_{\phi\mathbf{k}}/(c_{ng}|\mathbf{k}|)$ を u の関数としてプロットした (図 17(b) を参照)。もし $\Gamma_{\phi\mathbf{k}}/(c_{ng}|\mathbf{k}|) \geq 1$ を満たす領域があるならば、その領域において NG モードは過減衰である。図 17(b) から明らかに、 $|\mathbf{k}| = 0.1$ でかつ Mott 転移点に十分近いとき、NG モードは

過減衰であることがわかる。そして、 $|\mathbf{k}| = 0.2$ よりも大きな運動量を持つ NG モードは、 $u = 0.5$ から $u = 1$ の領域において過減衰でないことがわかる。このように長波長的な NG モードは転移点近傍において過減衰であることがわかる。

この節の最後に、減衰率 (150) の温度依存性を見てみよう。運動量の大きさを $|\mathbf{k}| = 0.1$ に固定したとして、そのときの温度依存性を示す (図 19 を参照)。この振る舞いは、温度が増大するにつれて散乱の相手となる熱的に励起された NG モードの個数が増え、それに伴い Landau 減衰の頻度が増大するからである。この描像は (151) 式が示唆する結果と対応している。その表式は Bose 分布関数を介して温度に依存するので、それぞれの温度に対する NG モードの分布密度に比例して減衰率が変化する。

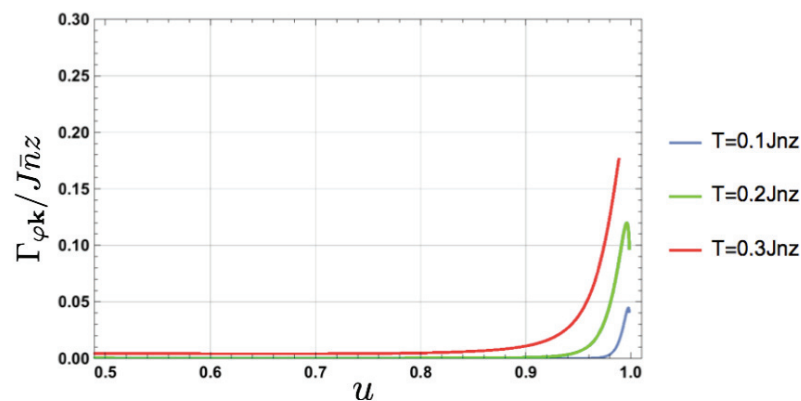


図 19: $|\mathbf{k}| = 0.1$ のときの NG モードの減衰率の温度依存性。 $T > \Delta$ となる領域は非物理的であるので除去した。

この節の議論をまとめよう。長波長近似を用いて (125) 式を近似し、簡単化された積分を計算することで、NG モードの減衰率に対して具体的な関数形 (150) を与えた。その関数の u 、 T 、 $|\mathbf{k}|$ に対する依存性を図 17 と図 19 にまとめた。温度依存性に関して、(151) 式より、減衰率はおおよそ Bose 分布関数に比例する割合で温度の上昇に対して増大することがわかった。長波長的な NG モードは転移点近傍において、有限温度由来のゆらぎの効果により強い減衰を示すことが分かった。 u の変化に対して減衰率が示す振る舞いに対して図 18 に示したような物理的な描像を与えた。

5.2 数値的な評価

(150) 式は、Higgs モードにおける対応する表式 (133) と同様、長波長近似が成り立つ領域においてのみ正しい。Higgs モードのときと同様、そのような領域は Mott 転移点近傍であり、図 16 と合わせて考えると、転移点から測っておよそ $u = 0.95$ 程度までである。 $u = 0.95$ よりも小さくなると長波長近似が妥当でなくなることは、エネルギー・運動量保存則 $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{\phi} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}_1}^{\alpha} + \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2}^{\phi} = 0$ を数値的に解いた結果からわかる。それを図 20 に示した。図に示した曲面は、熱的に励起された NG モードが持つ運動量で、エネルギー・運動量保存則で許される運動量の集合を表す。図 20 からわかる

ように、 $u = 0.95$ 程度で比較的短波長の領域からの寄与が生じるようになり、 $u = 0.9$ 程度になるとそのほとんどが短波長領域からの寄与となる。このように解析的表式 (150) の適用範囲は非常に狭いので、より広い領域にわたる減衰率の振る舞いを理解するためには、長波長近似を行わない結果が必要である。そこで以下では、(125) 式の総和を数値的に評価することで、長波長近似が妥当でない領域も含めた減衰率の振る舞いを調べる。その結果は解析的表式からの結果も含むはずであるので、それとの比較を考察する。

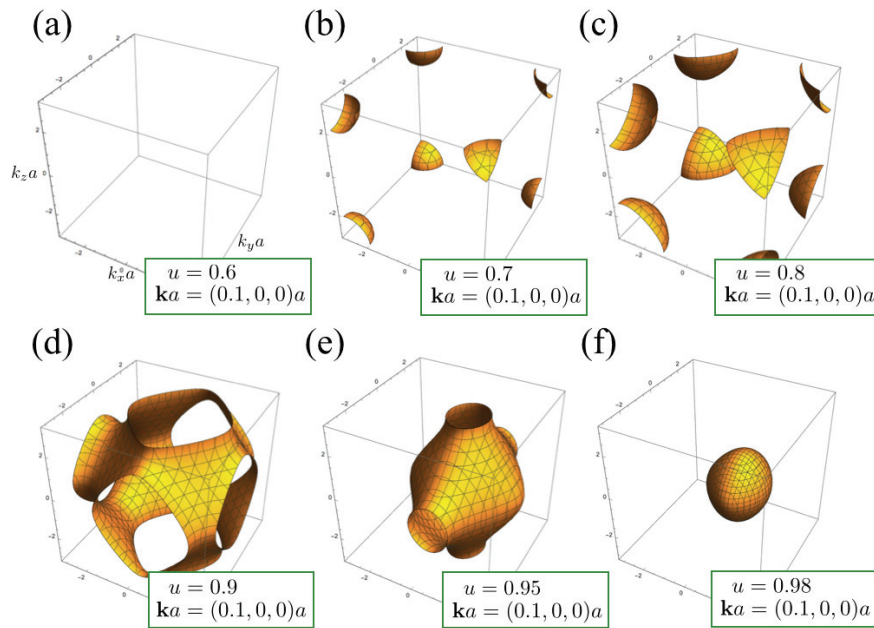


図 20: エネルギー・運動量保存則を数値的に解いて得られる解の集合。(a) から (f) に向かうにつれて u は 1 に近づく。原点から各図に示された曲面までの距離は、運動量 \mathbf{k} をもつ NG モードが吸収する熱的に励起された NG モードのもつべき運動量の大きさの程度である。この距離は転移点に近づく程小さく、 $u_{\text{th}}=0.608$ を境にして消失する。

数値計算の方法は本質的には Higgs モードのときと同じであるが、重要な違いは減衰率 (125) が入射する NG モードの運動量 \mathbf{k} の方向に依存することである。解析的表式を求める際に用いた長波長近似は、実際には系が格子上に置かれていることからくるバンドの異方性を等方的に近似する操作と同じである。したがって、解析的表式にはこれによる効果が含まれていない。しかしながら、長波長近似が妥当でない領域では、先験的にはそのような異方性から来る寄与が無視できない程度に存在すると期待できるので、以下ではこのことを考慮に入れて解析を行うものとする。具体的には、次の運動量空間中の 3 方向

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= (1, 0, 0), \\ \mathbf{e}_2 &= \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0 \right), \\ \mathbf{e}_3 &= \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \end{aligned}$$

のそれぞれに対して、NGモードの運動量の大きさ $|\mathbf{k}|$ 、温度 T 、そして u に関する減衰率の依存性を数値的に解析し、異なる方向間でその結果を比較する。

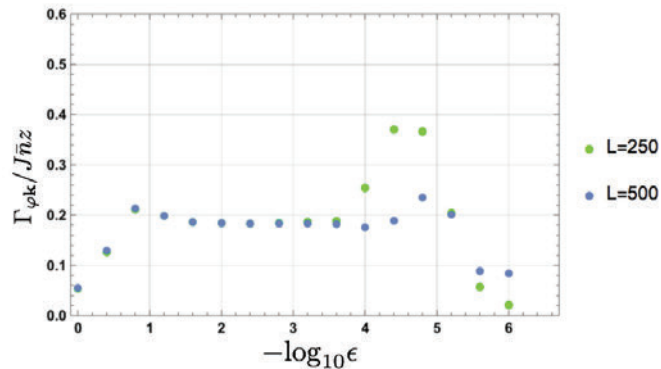


図 21: 数値計算結果の収束性の確認。 $L = 500$ において、およそ $\epsilon = 10^{-2}$ から $\epsilon = 10^{-4}$ の間に平坦な領域を見出すことができる。したがって、 $(L, \epsilon) = (500, 10^{-3})$ が最適なパラメータの組である。ここでは $(u, T, |\mathbf{k}|a) = (0.99, 0.3J\bar{n}z, 0.1)$ に対する出力を計算した。

数値計算を実行するには、第 4 章の Higgs モードのときと同様、 δ 関数を Gauss 関数で近似しなければならない。したがって最適なパラメータの組 (ϵ, L) を選ばなければならない。それを探すために行われた数値解析の結果を図 21 に示した。それによれば最適なパラメータは $(\epsilon, L) = (10^{-3}, 500)$ である。

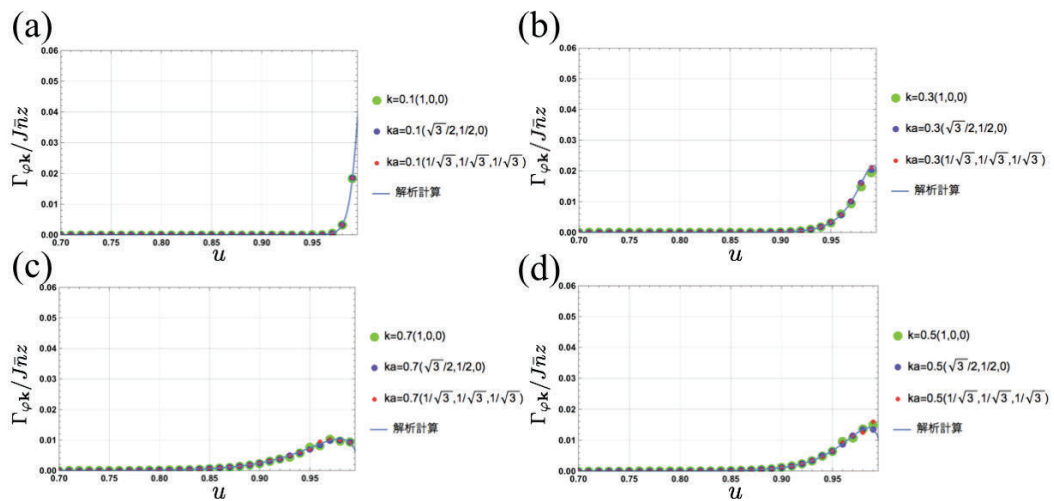


図 22: $T = 0.1J\bar{n}z$ のときの減衰率の u 依存性。

以下、パラメータ $(\epsilon, L) = (10^{-3}, 500)$ を用いて計算された結果を示し、それに対する考察を示そう。図 22 では $T = 0.1J\bar{n}z$ と固定したときの減衰率の運動量 $|\mathbf{k}|$ 依存性と u 依存性をみた。一つの図中で比較しているのは、運動量の大きさを固定したときの方向依存性とそれらとの解析的表式からの結果との比較である。図 22(a) から (d) のそれぞれの間の違いは、運動量 \mathbf{k} の大きさの違いである。図 22(a) から図 22(d) にいく程大きな $|\mathbf{k}|$ に対応する。これらの図から、解析的表式がそれが妥当な領域を越えて広い範囲で数値解析の結果と一致することがわかる。ここで、図 22(b) から

図 22(d) までで、その転移点近傍での振る舞いを見てみよう。ここでは、解析的表式からのずれだけでなく運動量の方向が異なるそれぞれの結果の間でのずれも目視できる。これはバンド異方性による効果であり、バンドを等方化して導いた解析的表式 (150) には存在しなかった振る舞いである。この結果は、実際の減衰率が、それ自身小さくはあるが、たしかにバンドの異方性に対する依存性を持っていることを示している。また、 $|\mathbf{k}| = 0.1$ においてこのような異方性が見出されないのは、バンドの異方性はそのバンド構造の短波長領域において出現し、長波長領域ではほとんど等方的と見なせるからである。

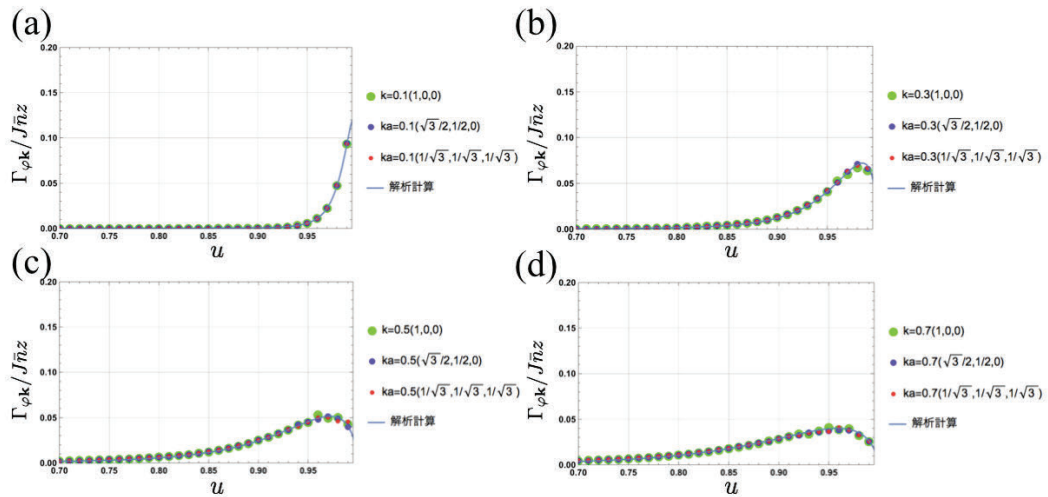


図 23: $T = 0.2J\bar{n}z$ のときの減衰率の u 依存性。

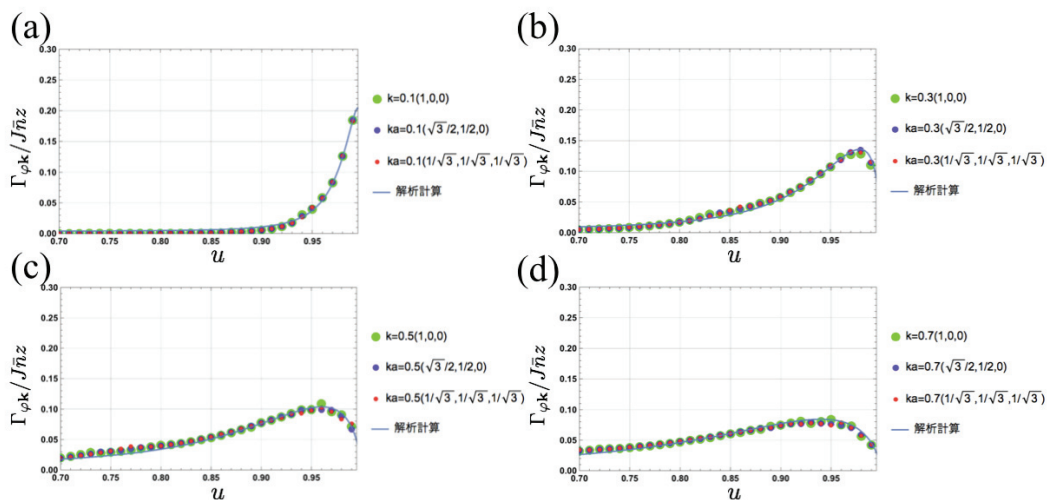


図 24: $T = 0.3J\bar{n}z$ のときの減衰率の u 依存性。

図 23 と図 24 では、温度をそれぞれ $T = 0.2J\bar{n}z$ と $T = 0.3J\bar{n}z$ としたときの図 22 と同様の数値計算の結果を示す。これらのすべてにおいて、図 22 と同様に、解析的表式と非常に良い一致が見られる。ここでもやはり図 23 と図 24 の (b) から (d) における転移点近傍でバンドの異方性による

振る舞いが確認でき、(a)においてはバンドの等方化がよい操作であることに対応してこのような異方性が現れないことがわかる。つまり、 $|\mathbf{k}| = 0.1$ 程度の運動量をもつ NG モードの減衰率には、バンドの異方性による振る舞いは目立って現れず、その一方で運動量を $|\mathbf{k}| = 0.3$ 程度まで大きくするとそのような異方性が見えるようになることがわかった。また、この振る舞いは $T = 0.1J\bar{n}z$ から $T = 0.3J\bar{n}z$ 程度までの温度領域では温度によらず見出せることがわかる。

この節の議論をまとめると次のようになる。数値計算の結果は、長波長近似が妥当な領域はもちろんのこと、長波長近似が妥当でない領域においても解析的表式と良い一致を示すことがわかった。数値計算の結果から、運動量 $|\mathbf{k}| = 0.1$ をもつ NG モードの減衰率にはバンドの異方性による振る舞いが目立って現れないことから、長波長近似で求めた表式が良い記述を与えることがわかった。また、数値計算の結果から、特に転移点の近傍において、バンド構造の異方性からくる減衰率の振る舞いを見出した。

6 まとめ

本論文では、光格子中の Bose 原子気体の超流動相における Higgs モードと NG モードの減衰を、特にその有限温度効果に着目して調べた。それぞれのモードの減衰率への寄与は、Higgs モードに対しては2つの NG モードへの崩壊により起こる Beliaev 減衰、NG モードに対しては熱的に励起された NG モードを吸収し、Higgs を生成することで起こる Landau 減衰に対応したダイアグラムで尽きており、その他の種類のダイアグラムは寄与しないことがわかった。これは少なくとも 1-loop の補正のみに着目するならばエネルギー・運動量保存則から帰結される。

場の理論より導かれる減衰率の表式に対して、Mott 転移点近傍において妥当である長波長近似を施すことで、その具体形を導出した。解析的に導出された Higgs モードの減衰率が、Mott 転移点近傍において温度により決まる有限の値を持つことがわかった。これらの値は高温である程大きく、またその大きさは、典型的な温度において過減衰にならない程度の大きさであることがわかった。さらに得られた表式の絶対零度の極限が示す転移点近傍における振る舞いが、先行研究 [29] が示した絶対零度における Higgs モードの転移点近傍での減衰率が持つ振る舞いと一致することから、得られた表式が先行研究による絶対零度の減衰率に対する有限温度補正効果を与えることがわかった。

また、解析的に導出された NG モードの減衰率が、Mott 転移点へ近づくにつれて、ゼロから有限の大きな値へ増大することを示した。減衰率を NG モードの振動数で割った量が、Mott 転移点近傍において k に逆比例して発散する振る舞いを持ち、 $|\mathbf{k}| = 0.1$ 程度の運動量に対しては NG モードが過減衰になることがわかった。系の温度の増大は Landau 減衰における相互作用の相手となる NG モードの数を、およそ Bose 分布関数に比例する割合で増やすので、結果として減衰率の増大を導くことがわかった。

解析的に導出された減衰率の正当性を議論するために、場の理論により導かれた減衰率を数値的に積分した。その結果、Higgs モードの減衰率の数値計算結果は、長波長近似が成り立つ領域で

は解析計算の結果と非常に良く一致し、成り立たない領域では幾分かのずれが生じるが、その主要な振る舞いは解析的な表式により記述されることがわかった。

また、NGモードの減衰率に対する数値計算結果が、長波長近似が妥当でない領域でも解析的表式の結果とよく一致することがわかった。 $|\mathbf{k}| = 0.1$ 程度の長波長領域では、減衰率にはバンドの異方性に起因する振る舞いが目立って現れず、したがって解析的表式の結果が十分に良い記述を与えることがわかった。運動量の大きさが $|\mathbf{k}| = 0.3$ 程度の大きさになるとバンドの異方性効果が現れ始め、特にそれは転移点近傍において顕著であることがわかった。また、バンドの異方性に関する上記の効果が $T = 0.1J\bar{n}_z$ から $T = 0.3J\bar{n}_z$ までの範囲で温度によらず存在することを見た。

7 展望

本論文では系の充填率が十分に大きいと仮定して解析を行った。しかしながら、典型的な冷却原子気体の実験系における1サイトあたりの充填率はせいぜい1から10のオーダーであるため、実験系と十分に対応した結論を得るためには低い充填率のときの解析が必要となる。充填率が低い場合、有効スピン模型に対して付加的な項を考慮に入れる必要があり、それは、例えばBogoliubov変換の解析的な実行を困難にする。今後の研究では、充填率が小さいときに生じるいくつかの困難を解消し、現実の系により対応する解析を行う予定である。

本論文で考察したのは、連続的対称性が自発的に破れた冷却原子気体における秩序変数の固有振動モードの緩和である。減衰の時間スケールは減衰率の逆数で与えられ、一般に、それは系全体の熱平衡化にかかる時間に比して短い。ところで近年、冷却原子系などの孤立量子系の長時間にわたる非平衡ダイナミクスが興味を集めている [71]。例えば、孤立量子系の熱平衡化、ハミルトニアンがもつパラメータを突然に変化させた後の時間発展を追うクエンチダイナミクス、速度スケールの異なる平衡緩和の実現などが盛んに議論されている。これらの新しい研究テーマから得られた視座から本研究を見直してみると、例えば、系に生じた素励起の長時間にわたる熱化のダイナミクスを具体的な模型を用いて調べることで、模型に特有の振る舞いはもちろんのこと、模型に依存しない一般的な法則を見出すことに興味を持たれるであろう。今後の研究では、本論文における集団励起の減衰に関する研究のある方向への発展として、光格子中の超流動 Bose 原子気体の熱平衡化の過程における非平衡ダイナミクスを研究する予定である。具体的には、近年量子多体系のダイナミクスを記述する有用な手法として注目されている Truncated Wigner Approximation (TWA) [72, 73] を応用した解析を計画している。

謝辞

京都大学基礎物理学研究所での修士課程の2年間において、修士論文の課題として取り組んだ本研究を遂行するためには、多くの研究者・学生の方々からのご助言ご助力が必要不可欠でした。研究の指導教員である段下一平助教には、冷却原子系を何も知らなかった私に懇切丁寧な指導をくださったこと、またこのような教育的なテーマを与えてくださったことに心より感謝申し

上げます。大学院における指導教員である戸塚圭介准教授には、本研究に対する様々なコメント、そして論文の輪講において懇切丁寧な指導をしていただきましたことに感謝申し上げます。また、佐藤昌利教授、下出敦夫博士、そして田中宗助教(現早稲田大学高等研究所)には、研究室セミナーにおいて多くのコメントをくださったことを感謝しています。本研究の結果について発表を行った第70回日本物理学会に際して、その発表練習のための場を設けてくれた二国徹郎教授(東京理科大学)に感謝申し上げます。また、発表練習の場において有益なコメントをくださった土屋俊二准教授(東北工業大学)、渡部昌平助教(東京理科大学)、そして中山健さん(東大物性研)に感謝申し上げます。研究内容について多くの人々と議論をするために参加した各地での研究会において、多くの人々から意見をいただきました。特に、山本大輔助教(早稲田大学高等研究所)、福原武博士(理化学研究所)、高橋淳一さん(早稲田大学)、藤本和也さん(大阪市立大学)、中川裕也さん(東大物性研)に感謝申し上げます。基礎物理学研究所への来訪時に個人的に議論をしてくださった高橋大介博士(理化学研究所)、そして久保百合香さん(早稲田大学)に感謝申し上げます。また、冷却原子系の実験家の立場から本研究に更なる発展の可能性を与える興味深い提案をくださった高橋義朗教授(京都大学)に感謝申し上げます。第60回物性若手夏の学校において私が世話人を担当した講義を快く引き受けてくださった古崎昭博士(理化学研究所)には、ギャップレスな集団励起を持つ1次元系を記述する朝永-Luttinger液体論、そしてそれを構成するBoson化法について多くのことを学ばせていただきました。ここに感謝申し上げます。研究室の学生の皆様には、研究室の活動ではもちろんのこと、普段の生活においてもお世話になりました。同じ研究室の杉本高大博士(現千葉大学)、新城一矢さん、谷本和彦さん、太田卓見さん、今村征央さん、京都大学大学院理学研究科凝縮系理論グループの中川大也さん、足立景亮さん、岩堀功大さん、高三和晃さん、弾雄一郎さん、そして統計動力学研究室の佐野友彦さん、高田智史さんに感謝申し上げます。最後に、いつも心配をかけてばかりの私をいつも暖かく見守ってくれている両親と弟に感謝します。(謝辞を挙げた方々の所属・肩書きは修士論文を提出した時点でのものです。)

参考文献

- [1] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hansch, and I. Bloch, *Nature (London)* **415**, 39 (2002).
- [2] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 885 (2008).
- [3] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I. E. Dzyaloshinski, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*, (Dover Publications, New York, 1975).
- [4] Y. Nambu, *Phys. Rev.* **117**, 648 (1960).
- [5] J. Goldstone, *Nuovo Cimento* **19**, 154 (1961).
- [6] P. T. Ernst, S. Götze, J. S. Krauser, K. Pyka, D. -S. Lühmann, D. Pfannkuche, and K. Sengstock, *Nat. Phys.* **6**, 56 (2009).
- [7] T. Stöferle, H. Moritz, C. Schori, M. Köhl, and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 130403 (2004).
- [8] D. Pekker and C. M. Varma, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **6**, 269 (2015).
- [9] M. Endres, T. Fukuhara, D. Pekker, M. Cheneau, P. Schauß, C. Gross, E. Demler, S. Kuhrm, and I. Bloch, *Nature* **487**, 454 (2012).
- [10] U. Bissbort, S. Götze, Y. Li, J. Heinze, J. S. Krause, M. Weinberg, C. Becker, K. Sengstock, and W. Hofstetter, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 205303 (2011).
- [11] S. Sachdev, *Quantum Phase Transition Second Edition*, (Cambridge University Press, 2011).
- [12] P. W. Higgs, *Phys. Rev. Lett.* **13**, 508 (1961).
- [13] G. E. Volovik and M. A. Zubkov, *J. Low Temp. Phys.* **175**, 486 (2014).
- [14] R. Sooryakumar and M. V. Klein, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 660 (1980); *Phys. Rev. B* **23**, 3213 (1981).
- [15] P. B. Littlewood and C. M. Varma, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 811 (1981); *Phys. Rev. B* **26**, 4883 (1982).
- [16] M. -A. Méasson, Y. Gallais, M. Cazayous, B. Clair, P. Rodière, L. Cario, and A. Sacuto, *Phys. Rev. B* **89**, 060503 (2014).
- [17] R. Matsunaga, Y. I. Hamada, K. Makise, Y. Uzawa, H. Terai, Z. Wang, and R. Shimano, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 057002 (2013).
- [18] R. Matsunaga, N. Tsuji, H. Fujita, A. Sugioka, K. Makise, Y. Uzawa, H. Terai, Z. Wang, H. Aoki, and R. Shimano, *Science* **345** 6201 (2014).

- [19] D. Sherman, U. S. Pracht, B. Gorshunov, S. Poran, J. Jesudasan, M. Chand, P. Raychaudhuri, M. Swanson, N. Trivedi, A. Auerbach, M. Scheffler, A. Frydman, and M. Dressel, *Nat. Phys.* **11**, 188 (2015).
- [20] $\text{Nb}_{1-x}\text{Ti}_x\text{N}$ に対する実験結果から見えている現象が本当に Higgs モードに由来するか否かに関しては諸説ある。実験的に観測された事象は、Higgs モードによるものでなく、実際には Cooper 対の対崩壊によるものだとする理論がある ; T. Cea, C. Castellani, and L. Benfatto, arXiv:1512.02544; T. Cea, C. Castellani, G. Seibold, and L. Benfatto, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 157002 (2015).
- [21] J. Demsar, K. Biljaković, and D. Mihailovic, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 800 (1999).
- [22] H. Schaefer, V. V. Kabanov, and J. Demsar, *Phys. Rev. B* **89**, 045106 (2014).
- [23] R. Yusupov, T. Mertelj, V. V. Kabanov, S. Brazovskii, P. Kusar, J.-H. Chu, I. R. Fisher, and D. Mihailovic, *Nat. Phys.* **6**, 681 (2010).
- [24] T. Mertelj, P. Kusar, V. V. Kabanov, P. Giraldo-Gallo, I. R. Fisher, and D. Mihailovic, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 156401 (2013).
- [25] Ch. Rüegg, B. Normand, M. Matsumoto, A. Furrer, D. F. McMorrow, K. W. Kramer, H. U. Gudel, S. N. Gvasaliya, H. Mutka, and M. Boehm, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 205701 (2008).
- [26] H. Kuroe, N. Takami, N. Niwa, T. Sekine, M. Matsumoto, F. Yamada, H. Tanaka, and K. Takemura, *J. Phys.: Conf. Series* **400**, 032042 (2012).
- [27] O. Avenel, E. Varoquaux, and H. Ebisawa, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 1952 (1980).
- [28] C. A. Collett, J. Pollanen, J. I. A. Li, W. J. Gannon, and W. P. Halperin, *J. Low Temp. Phys.* **171**, 214 (2013).
- [29] E. Altman and A. Auerbach, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 250404 (2002).
- [30] D. Podolsky, A. Auerbach, and D. P. Arovas, *Phys. Rev B* **84**, 174522 (2011).
- [31] [29] における private communication によれば、[70] で議論されている方法により示せる。
- [32] L. Pollet and N. Prokof'ev, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 010401 (2012).
- [33] S. Gazit, D. Podolsky, A. Auerbach, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 140401 (2013).
- [34] L. Liu, K. Chen, Y. Deng, M. Endress, L. Pollet, and N. Prokof'ef, arXiv:1509.06828.
- [35] A. Rançon and N. Dupuis, *Phys. Rev. B* **89**, 180501 (2014).

- [36] T. Nakayama, I. Danshita, T. Nikuni, and S. Tsuchiya, *Phys. Rev. A* **92**, 043610 (2015).
- [37] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **40**, 546 (1989).
- [38] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3108 (1998).
- [39] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1225 (2010).
- [40] D. van Oosten, P. van der Straten, and H. T. C. Stoof, *Phys. Rev. A* **63**, 053601 (2001).
- [41] W. Krauth, M. Caffarel, and J. Bouchaud, *Phys. Rev. B* **45**, 3137 (1992).
- [42] B. Capogrosso-Sansone, N. Prokof'ev, and B. Svistunov, *Phys. Rev. B* **75**, 134302 (2007).
- [43] B. Capogrosso-Sansone, S. Soyler, N. Prokof'ev, and B. Svistunov, *Phys. Rev. A* **77**, 015602 (2008).
- [44] T. D. Kühner, S. R. White, and H. Monien, *Phys. Rev. B* **61**, 12474 (2000).
- [45] S. Ejima, H. Fehske, and F. Gebhard, *EPL* **93**, 30002 (2011).
- [46] T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension*, (Oxford university press, New York, 2003).
- [47] L. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, (Oxford university press, New York, 2003).
- [48] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, (Cambridge University Press, 2008).
- [49] D. S. Fisher and P. C. Hohenberg, *Phys. Rev. B* **37**, 4936 (1988).
- [50] J. Schwinger, *On Angular Momentum*, (Dover Publications, New York, 2015).
- [51] Papanikoraus, *Nucl. Phys. B* **240**, 281 (1984).
- [52] A. Joshi, M. Ma, F. Mila, D. N. Shi, and F. C. Zhang, *Phys. Rev. B* **60**, 6584 (1999).
- [53] S. Huber, E. Altman, H. P. Büchler, and G. Blatter, *Phys. Rev. B* **75**, 085106 (2007).
- [54] E. Altman, W. Hofstetter, E. Demler, and M. D. Lukin, *New Journal of Physics* **5**, 113.1 (2003).
- [55] M. C. Gutzwiller, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 159 (1963).
- [56] D. S. Rokhsar and B. G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **44**, 10328 (1991).
- [57] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics part I*, (Elsevier, Oxford, 1980).
- [58] T. Holstein and H. Primakoff, *Phys. Rev.* **58**, 1908 (1940).

- [59] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, (Springer-Verlag, New York, 1994).
- [60] N. D. Mermin and H. Wanger, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [61] S. Coleman, *Commun. Math. Phys.* **31**, 259 (1973).
- [62] A. Altland and B. Simons, *Condensed Matter Field Theory*, (Cambridge University Press, Cambridge, 2006).
- [63] V. N. Popov, *Functional Integrals and Collective Excitations*, (Cambridge University Press, 1987).
- [64] 西川恭治, 森弘之, *統計物理学*, (朝倉書店, 2000).
- [65] S. Tsuchiya and A. Griffin, *Phys. Rev. A* **70**, 023611 (2004).
- [66] S. Tsuchiya, *Theory of Bose-Einstein Condensates in Optical Lattices*, (Ph. D. Thesis, Waseda university, 2005).
- [67] S.T. Beliaev, *Sov. Phys. JETP* **34**, 299 (1958).
- [68] E. M. Lifshitz and L. Pitaevskii, *Statistical Physics part 2*, (Pergamon Press, Oxford, 1980).
- [69] E. M. Lifshitz and L. Pitaevskii, *Physical Kinetics*, (Pergamon Press, Oxford, 1981).
- [70] S. Sachdev, *Phys. Rev. B* **55**, 142 (1997).
- [71] A. Polkovnikov, K. Sengupta, A. Silva, and M. Vengalattore, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 863 (2011).
- [72] A. Polkovnikov, *Annals of Physics* **325**, 1790 (2010).
- [73] S. M. Davidson and A. Polkovnikov, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 045701 (2015).