

シンプレクティック数値積分の BEC 系への応用

日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター 佐々 成正 (Narimasa SASA)
Center for Promotion of Computational Science and Engineering, Japan Atomic Energy Agency

1 はじめに

近年、希薄中性原子気体のボーズ-アインシュタイン凝縮系研究に注目が集まっている。注目される理由はいくつかあって、1つは、磁気トラップされた希薄原子気体を極低温に冷却することで理想的なボーズ-アインシュタイン凝縮系を実現した初めての系であること。これは主に物理学的な興味からである。また、原子気体を捕獲するトラップポテンシャルの形を比較的自由に変えることができるため、今後、原子気体を使ったデバイス等への応用が期待されていること。これは工学的な理由からである。

本研究では、ボーズ-アインシュタイン凝縮系に生成される量子渦のダイナミクスについて考察をおこなう。量子凝縮体中に生成される量子渦はその循環が量子化されるという、通常の渦にはない特徴を持っている。このため、量子渦のダイナミクスは十分に複雑ではあるが、通常流体の渦のダイナミクスと比較すると、いくつかの自由度を固定したモデルケースと考えることができる。原子気体ボーズ-アインシュタイン凝縮系では、凝縮体をトラップしたまま回転させることで、量子渦系を凝縮体内に多数侵入させ渦系格子状態を作った観測例が多数報告されている。この格子状態に至るまでの量子渦系ダイナミクスを理解するためには、系の巨視的波動関数の時間発展問題を数値的に解くことが必要である。通常、渦格子状態は自由エネルギーが極小の状態として理解されているため、何らかの散逸を仮定したシミュレーションを用いて格子状態を実現させている。この、散逸効果を取り入れたモデル方程式はいろいろなタイプが提案されており [1]、決定的なモデル方程式に対する結論はまだ出ていない。

このような状況の中で最近、散逸を含まない保存系での数値シミュレーションから渦格子状態が出現するという報告がいくつかなされている [2,3]。これまでの常識では散逸の無い系で渦格子状態はできないと考えられるので、なぜこのようなことが起こるかについて、興味のわくところである。そこで、本研究ではこの散逸を含まないモデル方程式について、数値シミュレーションを中心とした詳しい考察をおこないたい。

なお、本研究は日本原子力機構、町田昌彦氏、石川工業高専、笠松健一氏、大阪市立大学、坪田誠氏との共同研究に基づくものである。

2 基礎方程式

ボーズ-アインシュタイン凝縮系の巨視的波動関数 ψ は絶対零度においてグロス-ピタエフスキー方程式に従うことが知られている。我々は、散逸のない回転系において量子渦格子生成が起こるか否かを確認するため、 ψ に対する以下の基礎方程式で記述される系 (2次元系) を考察する。

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{tr} + g|\psi|^2 - \Omega L^z \right] \psi \quad (1)$$

ここで、 V_{tr} は原子ガスを捕獲するための磁気光学トラップポテンシャル、

$$V_{tr} = \frac{m\omega_{\perp}^2}{2} [(1 + \epsilon_x)x^2 + (1 + \epsilon_y)y^2] \quad (2)$$

を表し、 ϵ_x, ϵ_y はトラップポテンシャルの異方性を表すパラメータで、 $\epsilon_x = -0.025, \epsilon_y = 0.025$ としている。 m は原子の質量、 L^z は z 軸周りの角運動量 $L^z = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})$ 、 Ω は回転角速度である。また、 g は2体相互作用の大きさを表し、 $\omega_{\perp}$ はポテンシャルの捕獲周波数である。

この散逸のない回転系における渦格子生成の問題は、数値計算として非常に微妙な問題であるため、計算手法に正確さが要求される。方程式(1)はハミルトン系(エネルギー保存系)であるから、我々は、方程式(1)に対する数値計算手法として空間微分の計算にFFTを用い、時間進行には2次のシンプレクティック数値解法を用いた[4,5]。具体的にはまず、方程式(1)を適当にスケールした後、形式的に

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = L_1 \psi \quad [L_1 = -i(\partial_x - iA_x)^2] \quad (3)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = L_2 \psi \quad [L_2 = -i(\partial_y - iA_y)^2] \quad (4)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = N \psi \quad [N = -i\{V'_{tr} + g|\psi|^2\}] \quad (5)$$

と分割する。ここで、

$$V'_{tr} = [(1 - \Omega^2 + \epsilon_x)x^2 + (1 - \Omega^2 + \epsilon_y)y^2]/4 \quad (6)$$

で与えられ、 $A_x = -\Omega y/2, A_y = \Omega x/2$ である。方程式(3),(4)では、 A_x, A_y という表記を用いているが、これは物理的なベクトルポテンシャルを意味しているのではなく、単なる記号である。いま、方程式(3)-(5)を使って Δt 時間発展させることをそれぞれ $S_{L_1}(\Delta t), S_{L_2}(\Delta t), S_N(\Delta t)$ と表記する。方程式(3),(4)は線形方程式であるからFFTを使って解くことができる。通常、線形方程式(3),(4)を1つの式として計算すべきであるが、 A_x, A_y を含んでいるために、FFTを使う解法では分割しなくてはならない。一方、方程式(5)は常微分方程式であるから、これも簡単に積分することができる。このことから得られる1次の数値解法の公式は、

$$\psi(\Delta t) = S_{L_1}(\Delta t)S_{L_2}(\Delta t)S_N(\Delta t)\psi(0) \quad (7)$$

と与えられる。さらに、2次の数値解法の公式は、

$$\psi(\Delta t) = S_N(\Delta t/2)S_{L_1}(\Delta t/2)S_{L_2}(\Delta t)S_{L_1}(\Delta t/2)S_N(\Delta t/2)\psi(0) \quad (8)$$

で与えられる。必要があれば、4次の数値解法の公式も、

$$\begin{aligned} \psi(\Delta t) &= S_{4th}(\Delta t)\psi(0) \\ &= S_{2nd}(q\Delta t/2)S_{2nd}((1-2q)\Delta t)S_{2nd}(q\Delta t)\psi(0) \end{aligned} \quad (9)$$

として得られる[7]。但し、 $S_{2nd}(\Delta t)$ とは公式(8)のことであり、 $q = 1/(2-2^{1/3})$ である。本稿における数値シミュレーションでは特に断らない限り、2次の数値解法の公式(8)を用いて計算を行っている。この2次のシンプレクティックフーリエ法を用いると、エネルギー

$$H = \int \{ |(\partial_x - iA_x)\psi|^2 + |(\partial_y - iA_y)\psi|^2 + V'_{tr}|\psi|^2 + \frac{1}{2}g|\psi|^4 \} dx dy \quad (10)$$

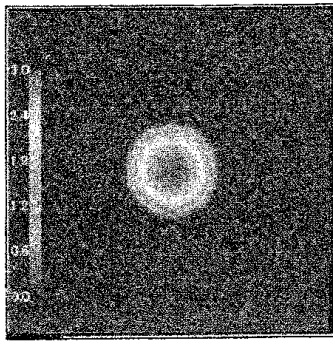


図.1(a) T=0

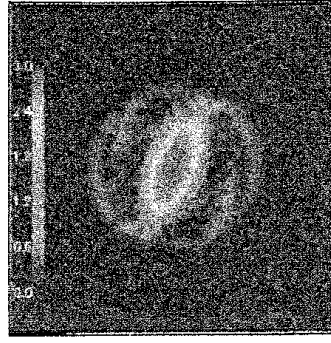


図.1(b) T=100

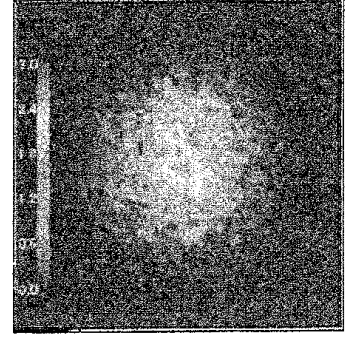


図.1(c) T=500

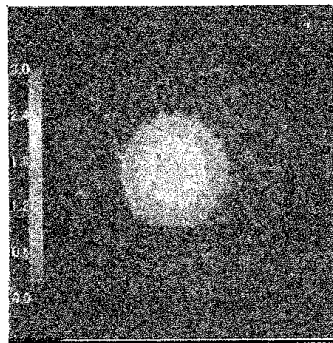


図.1(d) T=29900

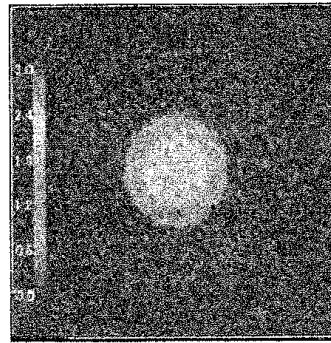


図.1(e) T=59900

図 1: 凝縮体の時間発展の様子 ($|\psi|$ をプロット)

の時間発展による初期値からのずれが、 $O(\Delta t^2)$ の範囲に収まることがわかっている。さらに全粒子数

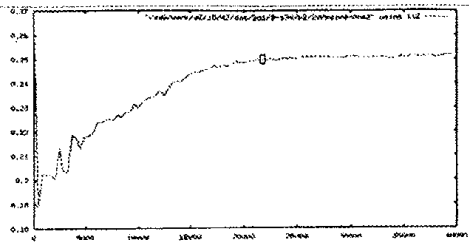
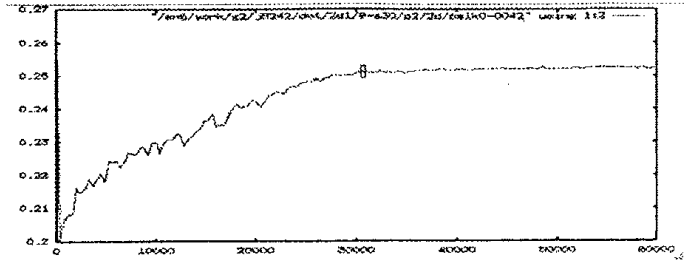
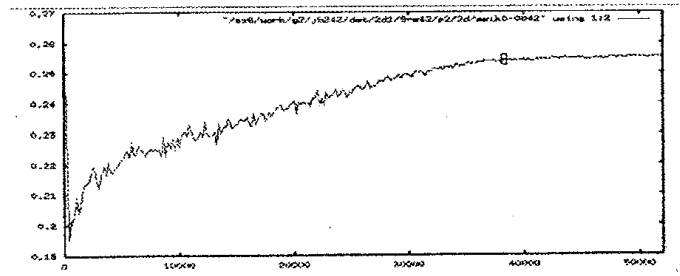
$$N = \int |\psi|^2 dx dy \quad (11)$$

は厳密な保存量である。このような数値計算に対する保証があるため、シンプレクティックフーリエ法を用いた計算を行った。

3 数値計算結果

方程式 (1) に対する数値シミュレーションは、 $T=0$ において回転のない定常的な凝縮体の分布に対し、突然回転 ($\Omega = 0.77$) を与えてその後の時間変化を追っている。ここでは、粒子数が 1.2×10^6 に対応する場合について計算をおこなった。

その時間発展の様子は、図.1(a)~(e) で与えられており、変形し複雑な運動を経て、(d) では量子渦が格子を作っていることが確認できる。この数値シミュレーションでは格子が形成されるまでの時間が実験とは比較にならないくらい、長時間かかっているために、直接実験事実を説明できるとは考えられない。しかしながら、このシミュレーションで注目すべき点は、時間はかかるけれども保存形で渦糸格子が形成されるという結果である。参考文献 [3] ではこの原因について高波数成分の乱流的な運動が原因でこのような、渦糸格子構造が形成されていると考察している。

図.2(a) $\Delta x = 1/3$ の場合図.2(b) $\Delta x = 1/4$ の場合図.2(c) $\Delta x = 1/8$ の場合図 2: $\sum_{|k| \leq k_c} |a_k|^2$ の時間発展の様子

我々は、この現象の本当の原因を探るべく、まず、巨視的波動関数を最終的に渦糸格子を形成する ψ_0 成分とそれ以外の成分 $\psi_\perp$ に分けた。

$$\psi = \psi_0 + \psi_\perp \quad (12)$$

すなわち、 ψ のフーリエ成分 a_k に対し、ある波数 k_c が存在して

$$\psi(r)_0 = \sum_{|k| \leq k_c} a_k e^{ikr} \quad (13)$$

$$\psi(r)_\perp = \sum_{|k| > k_c} a_k e^{ikr} \quad (14)$$

と書けると仮定する。ただし、全粒子数は保存しているので任意の時刻に対し、

$$\sum_{|k| \leq k_c} |a_k|^2 + \sum_{|k| > k_c} |a_k|^2 = \text{const} \quad (15)$$

が成り立っている。ここで、 $\sum_{|k| \leq k_c} |a_k|^2$ (波数 k_c 以下のフーリエ成分の 2 乗和) の時間発展を図 2 に表示した。図 2 (a) では、 $T=30000$ までは増え続け、その後は一定値になっていることを示している。図 1 と比較することによって、この量が一定値に到達することと、渦糸格子状態になることが対応していることがわかる。我々は空間メッシュを変えて、いくつかのケースについて計算した結果(図 2.(b),(c)) この渦糸格子状態の到達時間に強いメッシュ依存性があることを見出した。すなわち、空間メッシュを細かく取れば、渦糸格子到達までの時間が延びるという結果を得た。すなわち、このシミュレーションでは結果を信用するのに、十分な精度が得られていないことを示唆している。

5 まとめ

これまでの議論から、散逸の無いグロスーピタエフスキー方程式 (1) による時間発展の結果、渦糸格子が出現すると結論づけるには、数値計算の精度が不十分であることが判明した。この系に対する、数値計算手法としては、シンプレクティック数値解法を用いているため、粒子数とエネルギーに対しては、十分な計算精度が得られているはずである。しかしながら、系を軸対称に仮定した場合、保存すべき全角運動量に対する保存性が非常に悪いことが確認された。このために、渦糸格子到達時間の (空間) メッシュ依存が顕著に現れる結果になっていると推測できる。

参考文献

- [1] M. Tsubota, K. Kasamatsu and M. Ueda, *Phys. Rev. A* **65** (2002) 023603.
- [2] C. Lobo, A. Sinatra and Y. Castin, *Phys. Rev. Lett.* **92** (2004) 020403.
- [3] N.G.Parker and C.S.Adams, *cond-mat/0505730*
- [4] 佐々 成正, 吉田春夫, 応用数理 **10** No.2 (2000) 119–131.
- [5] N. Sasa, M. Machida, and H. Matsumoto *J. Low Temp. Phys.* **138** (2005) 618