

強い異方性トラップ中のボーズ・フェルミ混合気体のパイエルス不安定性

東京都立大学 宮川貴彦

共同研究者 藪博之、鈴木徹

フェルミ媒質中を運動するボーズ粒子の応答において、しばしばフェルミ分布のフェルミ面が原因となる異常が現れる。例えば金属結晶中の電子のフェルミ面による効果は波数 $2k_F$ (k_F はフェルミ波数) でのフォノンスペクトルに現れ、これはコーン異常として知られている。この異常が現実の物理系に大きな影響を与えるか否かは系の次元 (物質の構造) やボーズ粒子とフェルミ粒子間の相互作用に依存する。金属結晶では一次元導体と呼ばれる物質群において強いコーン異常が現れる。この効果によってある温度でフォノンの振動数がゼロになり、更に低温では波数 $2k_F$ の静的な格子歪みが現れる (パイエルス不安定性) [1]。このような機構による金属-絶縁体転移はパイエルス転移と呼ばれている。

同様な機構が原子のボーズ・フェルミ共存系においても生じ得ると我々は考えた。要点となるのはボーズ凝縮を起こすことで現れるボゴリューボフフォノンとフェルミ粒子との相互作用が、金属結晶中のフォノンと電子とのそれと同型である事である。本研究は強い異方性トラップ中に閉じ込められたボーズ・フェルミ混合気体のパイエルス不安定性の可能性を探る事が目的である。

• モデルと定式化

磁気トラップによって作られる調和振動子型ポテンシャル $U(\vec{r}) = \frac{1}{2}m\{\omega_r^2(x^2 + y^2) + \omega_z^2 z^2\}$ に閉じ込められた、スピン偏極したボーズ粒子とフェルミ粒子の混合気体を考える。ただしボーズ粒子とフェルミ粒子の質量 m とそれぞれの粒子が感じるトラップ振動数 $\omega_{r,z}$ は等しいとする。モデルハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d^3r \left[\hat{\phi}^\dagger(\vec{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) - \mu_b \right\} \hat{\phi}(\vec{r}) + \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) - \mu_f \right\} \hat{\psi}(\vec{r}) \right] \\ & + \frac{g_{bb}}{2} \int d^3r \hat{\phi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\phi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\phi}(\vec{r}) \hat{\phi}(\vec{r}) + g_{bf} \int d^3r \hat{\phi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \hat{\phi}(\vec{r}), \end{aligned} \quad (1)$$

で与えられる。ここに $\hat{\phi}^{(\dagger)}(\vec{r})$ と $\hat{\psi}^{(\dagger)}(\vec{r})$ はそれぞれボーズ/フェルミ場の消滅 (生成) 演算子を表す。 μ_b と μ_f はボーズ/フェルミ粒子の化学ポテンシャルであり、粒子数に関する拘束条件 $N_b = \int d^3r \langle \hat{\phi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\phi}(\vec{r}) \rangle$, $N_f = \int d^3r \langle \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \rangle$ によって決められる ($\langle \hat{A} \rangle$ は演算子 $\hat{A}$ の基底状態 $|0\rangle$ による平均)。 g_{bb} , g_{bf} はボソン-ボソン/ボソン-フェルミオン相互作用の結合定数で s 波散乱長 a_{bb} , a_{bf} と $g_{bb} = 4\pi\hbar^2 a_{bb}/m$, $g_{bf} = 4\pi\hbar^2 a_{bf}/m$ の関係を持つ。

本研究では絶対零度系のみを考える。ボゴリューボフの処方によりボーズ場の演算子を c 数の凝縮体部分 $\Phi(\vec{r})$ と非凝縮体部分 $\hat{\phi}(\vec{r})$ に分離する。基底状態において非凝縮体の寄与 ($O(N_b^{-1})$) を無視すると、凝縮体波動関数は次の Gross-Pitaevskii 方程式を満たす。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) + g_{bb}|\Phi(\vec{r})|^2 + g_{bf}n_f(\vec{r}) \right] \Phi(\vec{r}) = \mu_b \Phi(\vec{r}). \quad (2)$$

ここで $n_f(\vec{r}) \equiv \langle \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \rangle$ である。またボーズ粒子の交換関係を満たす準粒子演算子 $\hat{\beta}_\lambda^{(\dagger)}$ ($\hat{\beta}|0\rangle = 0$) を用いて非凝縮体演算子を $\hat{\phi}(\vec{r}) = \sum_\lambda \{u_\lambda(\vec{r})\hat{\beta}_\lambda - v_\lambda^*(\vec{r})\hat{\beta}_\lambda^\dagger\}$ と $\hat{\phi}^\dagger(\vec{r}) = \sum_\lambda \{u_\lambda^*(\vec{r})\hat{\beta}_\lambda^\dagger - v_\lambda(\vec{r})\hat{\beta}_\lambda\}$ で置き換える。一方フェルミ粒子の基底状態はハートリー方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) + g_{bf}n_0(\vec{r}) \right] \psi_n(\vec{r}) = \epsilon_n^f \psi_n(\vec{r}), \quad (3)$$

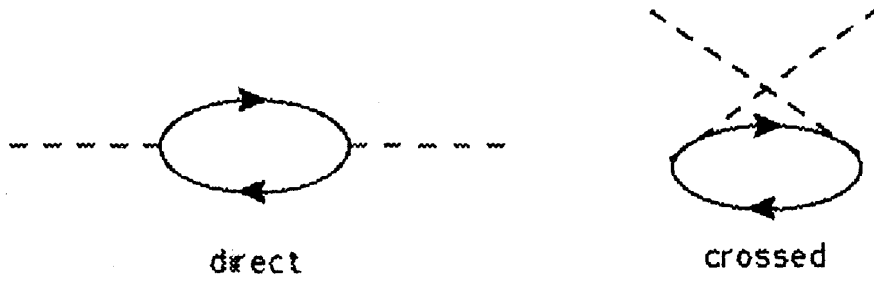


図 1: ボソンの自己エネルギー。破線：ボゴリューボフフォノン、実線：フェルミオンの粒子-空孔対。

の解である一粒子波動関数 $\psi_j(\vec{r})$ のスレーター行列式で与えられる。ここで凝縮体波動関数は実数として $\Phi(\vec{r}) = \sqrt{n_0(\vec{r})}$ とする。

我々が注目するのはボソンスペクトルに現れるコーン異常である。これは図 1 の様にボソンの自己エネルギーとして取り入れる事ができる。この自己エネルギーの寄与はフェルミ粒子の運動が一次元方向に偏っている場合に大きくなる。そこで以下では強い異方性トラップによって粒子の運動が一次元方向のみで記述される様な系を考える。このような系はトラップ振動数と、各粒子の化学ポテンシャルとが

$$\hbar\omega_r > \mu_{b,f}^{1D} > \hbar\omega_z \quad (4)$$

の様な関係にある時に生じるであろう。ここで $\mu_{b,f}^{1D}$ は x, y 方向の零点振動エネルギー $\hbar\omega_r$ を引いたものである。MIT ではトラップ振動数の比 $\omega_r/\omega_z = 100$ のトラップ中におけるボーズ凝縮体の性質が調べられた [2]。このとき凝縮体波動関数の $x(y)$ 成分は 1 次元調和振動子中にある自由粒子の波動関数 $\psi_n^{ho}(x)(\psi_n^{ho}(y))$ ($n = 0, 1, 2, \dots$, 固有エネルギー: ϵ_n^{ho}) の最低エネルギー状態で近似され、 z 空間の密度分布は理論から予想される Thomas-Fermi (TF) 型分布と一致している。(4) の様なエネルギースケールにおいては、我々が注目するフェルミエネルギー $\epsilon_F (= \mu_f)$ 程度までの粒子の状態は x, y 方向の自由度に関して凍結されていると考える。そして x, y 自由度の平均を行うと、一次元的な有効相互作用を

$$V_{bb,bf}(z, z') = g_{bb,bf}^{1D} \delta(z - z'); \quad g_{bb,bf}^{1D} = 2\hbar\omega_r a_{bb,bf} \quad (5)$$

の様に得られる。現実にはより複雑なパラメータの依存性を持っていると考えられるが、(4) の条件を満たす限り 3 次元性の効果は結合定数 $g_{bb,bf}^{1D}$ の定量的な変化として取り入れられるだろう。

以下では簡単のためハートリーポテンシャルを無視し、図 1 のダイアグラムで表されるような効果のみを含めた解析を行う。この時フェルミ粒子の 1 粒子状態は $\psi_j(\vec{r}) = \phi_0^{ho}(x)\phi_0^{ho}(y)\phi_j^{ho}(z)$ となる。また 1 次元調和振動子の波動関数の基底を用いて $u^\lambda(z) = \sum_n u_n^\lambda \phi_n^{ho}(z)$, $v^\lambda(z) = \sum_n v_n^\lambda \phi_n^{ho}(z)$ と展開する (x, y 方向は基底状態)。結局ボソンの励起エネルギーは次のような方程式を解く事によって得られる。

$$\sum_n [(\epsilon_n^{ho} - \epsilon_\lambda) \delta_{n,m} u_m^\lambda + \hbar \Pi_{m,n}(\epsilon_\lambda)(u_n^\lambda - v_n^\lambda)] = 0 \quad (6)$$

$$\sum_n [(\epsilon_n^{ho} + \epsilon_\lambda) \delta_{m,n} v_n^\lambda + \hbar \Pi_{m,n}(\epsilon_\lambda)(v_n^\lambda - u_n^\lambda)] = 0 \quad (7)$$

ここにボソンの自己エネルギー $\hbar\Pi_{m,n}$ は

$$\hbar\Pi_{m,n}(\epsilon_\lambda) = (g_{bf}^{1D})^2 N_0 \sum_{ph} \left[\frac{\langle mh|p0\rangle\langle 0p|hn\rangle}{\epsilon_\lambda - \epsilon_p^{ho} + \epsilon_{h,f}^{1D} + i\eta} - \frac{\langle mp|h0\rangle\langle 0h|pn\rangle}{\epsilon_\lambda - \epsilon_h^{ho} + \epsilon_{p,f}^{1D} + i\eta} \right] \quad (8)$$

で与えられる。また行列要素等は凝縮体、非凝縮体およびフェルミ粒子の粒子、空孔状態との行列要素で、 $\langle mh|p0\rangle = \int dz \phi_m^{ho} \phi_h^{ho} \phi_p^{ho} \varphi_0$ である。

• パイエルス不安定性の条件

トラップ系の効果として考えられるのは、密度分布の非一様性である。ボソンの自己エネルギーは凝縮体と非凝縮粒子そしてフェルミ粒子、空孔との散乱を含んでいる。トラップされた粒子の分布は高い運動量を持つ状態ほど広がっている。一様系ではフェルミ面の特異性を反映して、ボソン自己エネルギーは対数発散する事が確認できる。一方トラップ系では並進対称性が破れているため、運動量は非保存となる。そのため運動量非保存の散乱過程が許されるため、特異なフェルミ面の寄与がばかされ、一様系と比較してコーン効果が弱められる。

通常の実験パラメータの範囲では、ボーズ粒子の粒子数がフェルミ粒子のそれに比べて極端に大きくない限り、粒子統計性を反映してフェルミエネルギーはボーズ粒子の化学ポテンシャルに比べて大きくなる。つまり式 (4) に加えて

$$\hbar\omega_r > \mu_b^{1D} > \mu_b^{1D} > \hbar\omega_z \quad (9)$$

のエネルギースケールの系を考える事になる。一様系の解析で分かる事であるが、パイエルス不安定は波数 $2k_F$ の運動量を持つ状態に現れる。これは有限系では多ノード数 (大きい量子数 $n \gg 1$) を持った状態に対応する。つまりフェルミエネルギー ϵ_F 程度のエネルギーを持つ粒子の散乱が重要な領域に焦点をあてる。(9) を持つような系では大きい量子数を持つ状態 $n \gg 1$ に対して v_n^λ は無視できる。大きい量子数を持つ調和振動子波動関数はトラップ内部で

$$\phi_n^{ho}(z) \sim \left(\frac{\sqrt{2}}{\pi L_n} \right)^{1/2} \cos \left(k_n z - \frac{n\pi}{2} \right); |z| < L_n \quad (10)$$

と近似される。ここで $k_n = \sqrt{2n}/a_{ho}$ 、 $L_n = \sqrt{2na_{ho}}$ ($a_{ho} = \sqrt{\hbar/m\omega}$) はそれぞれ状態 n の運動量と波動関数の広がりを表している。フェルミエネルギー、 $\epsilon_F = N_F \hbar\omega$ 、を持つ粒子 n_F の運動量と広がりをそれぞれ k_F と L_F で示す。

(9) より、 $\mu_b > \hbar\omega_z$ であるから、凝縮体波動関数は TF 型であり、

$$\varphi_0(z) \propto \left[1 - \frac{z^2}{z_{TF}^2} \right]^{1/2} \theta(z_{TF} - |z|) \quad (11)$$

で良く近似される。ここに $z_{TF} = \sqrt{2}a_{ho}(3N_0\beta/4\sqrt{2})$ ($\beta = mg_{bb}^{1D}a_{ho}/\hbar^2$) は凝縮体の広がりである。通常の実験パラメータの領域ではボーズ粒子とフェルミ粒子の数が同程度での時 $\mu_f \gg \mu_b$ である。これより $L_F > z_{TF}$ である。従って行列要素 $\langle mh|p0\rangle$ 中の波動関数を (10) 式で近似すると、一次の第一種ベッセル関数 $J_1(k)$ の公式からこれを計算できる。

$$\int_{-1}^{+1} e^{ikz} [1 - z^2]^{1/2} = \frac{\pi}{k} J_1(k) \quad (12)$$

$$\langle mh|p0\rangle \propto c_p^{mh} \frac{J_1(z_{TF}\{k_m + k_h - k_p\})}{z_{TF}\{k_m + k_h - k_p\}} + c_h^{mp} \frac{J_1(z_{TF}\{k_m + k_p - k_h\})}{z_{TF}\{k_m + k_p - k_h\}} \quad (13)$$

$$+ c_{ph}^m \frac{J_1(z_{TF}\{k_m - k_p - k_h\})}{z_{TF}\{k_m - k_p - k_h\}} + c_{mph} \frac{J_1(z_{TF}\{k_m + k_h + k_p\})}{z_{TF}\{k_m + k_h + k_p\}} \quad (14)$$

c_p^{mh} などは定数であり、他の行列要素も同様に得ることが出来る。これらの結果は凝縮体の構造が直接反映されている。一様系では散乱過程での運動量保存から行列要素は δ 関数型で記述されるのに対して、トラップ系では運動量非保存の過程も含まれている。ベッセル関数の性質を用いて分極ポテンシャルに最も寄与する項を求めよう。 $J_1(x)/x \propto x^{-3/2}$; $x \gg 1$ から $O(1)$ となる項のみを残す。パリエルス不安定となるモードは $k_m = 2k_F$ 程度の運動量を持つであろうから、(13) 式中の 2、4 項目は $z_{TF}k_F \gg 1$ より全て無視される。行列要素として残るのは $k_p + k_h \sim 2k_F$ などの項のみである。更に簡単な解析を行うためにベッセル関数の積に関して $J_1(z_1) \cdot J_1(z_2)/z_1 z_2 \sim \frac{1}{4}\theta(1-|z_1|)\theta(1-|z_1-z_2|)$ を用いる。これらからボーズ粒子のモードとフェルミ粒子の粒子-空孔対のモードの結合によって現れる集団モードの固有振動数は次のように得る事が出来る。連続極限を取る事により次のように与えられる ($v_F = \hbar k_F/m$)。

$$\hbar\omega_\lambda = 4e_F - \frac{(g_{bf}^{1D})^2 n_0(0)}{4\pi\hbar v_F} \ln \left| \frac{64k_F^4 - (2m\omega_\lambda/\hbar)^2}{4k_F^2/z_{TF}^2 - (2m\omega_\lambda/\hbar)^2} \right| \quad (15)$$

無次元ボソン・フェルミオン結合定数 $\zeta = (g_{bf}^{1D})^2/\pi g_{bb}^{1D}\hbar v_F$ とトラップ中心でのボゴリューボフ音速 $v_B = \sqrt{g^{1D}n_0(0)/m}$ を用いて、パリエルス不安定となる条件は $k_F z_{TF}$ の最低次で

$$1 < \frac{\zeta}{4} \frac{v_B^2}{v_F^2} \ln |4k_F z_{TF}| \quad (16)$$

と得られる。一様系で現れる対数発散項は有限値 $\ln(k_F z_{TF})$ で置き換えられている。そしてその大きさは凝縮体のサイズに依存している。この事から (16) 式を満たすパラメータにおいては調和振動子型ポテンシャル中のボーズ-フェルミ混合気体においてもパリエルス不安定になる事が分かった。

実際の実験パラメータと対応づけるため、(5) 式を使うと

$$\frac{v_B^2}{v_F^2} = \frac{1}{4N_f} \left(3N_0 \frac{\omega_r}{\omega_z} \frac{a_{bb}}{\chi_z} \right)^{2/3}, \quad \zeta = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{2}{N_f} \frac{\omega_r}{\omega_z} \frac{a_{bf}^2}{a_{bb}\chi_z}} \quad (17)$$

のような関係が得られる。パリエルス不安定性を起こす候補としてルビジウム同位体によるボーズ・フェルミ混合系 ^{87}Rb - ^{84}Rb が挙げられる。これらの原子間には比較的大きなボーズとフェルミ粒子の散乱長 ($a_{bf} = 29.1[\text{nm}]$) を持つとされている [3]。十分に異方性の強いトラップ ($\omega_r/\omega_z = 1500$) においては、凝縮体とフェルミ粒子の粒子数がそれぞれ $N_f = 10^3$, $N_0 = 2 \times 10^4$ の場合には条件 (16) を満足する事が確認された。この結果は平均場近似を基礎として得られた結果であるので低次元で重要な揺らぎの効果、および現実の 1 次元導体のパリエルス転移で重要な役割を果たしている 3 次元性の効果については今後議論しなければならない。

[1] S. Kagoshima, H. Nagasawa, and T. Sambongi, *One-Dimensional Conductors* Springer Series in Solid-State Science 72, (Springer-Verlag, 1988).

[2] A. Görlitz, et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 130402 (2001).

[3] J. P. Burke, Jr. and J. L. Bohn, Phys. Rev. A **59**, 1303 (1999).