

ボーズアインシュタイン凝縮系に対する 3 次元非線形シュレーディンガー方程式の数値解法

日本原子力研究所・計算科学 佐々 成正 (Narimasa SASA)
町田 昌彦 (Masahiko MACHIDA)
筑波大学・物理 松本 秀樹 (Hideki MATSUMOTO)

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に注目が集まっており、多くの研究が行なわれている。この現象は 1995 年に C.E. Wieman らによって最初に発見された [1]。彼らは、ルビジウムの希薄気体を磁気トラップで閉じ込めた上で、レーザー冷却、蒸発冷却等の技術を用いて極低温に冷却し気体のままボーズアインシュタイン凝縮を起こすことに成功した。その後、ナトリウム、リチウム等の物質でも同様の現象が確認され、現在までに数多くの物質でボーズアインシュタイン凝縮が起こることが確かめられている。この系が注目される理由の 1 つに、系の巨視的波動関数を光学的に直接観測出来るということが挙げられる。これまでの金属超伝導体やヘリウム超流動体ではボーズアインシュタイン凝縮が物質の内部で起こっているため、それを光学的に見ることはできなかった。しかし、希薄中性原子気体のボーズアインシュタイン凝縮系ではこのことが可能となり、条件がそろえば系の巨視的波動関数の時間発展を直接観測することも可能である。

その典型的な例として、量子渦糸の生成を挙げることができる。凝縮体をトラップしたまま回転させることで、量子渦糸を凝縮体内に多数侵入させ渦糸格子状態を作った観測例が多数報告されている [2]。また、最終的な格子状態だけではなく格子を組む前の中間状態の様子も報告されている。従って、これらの渦糸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解くことが是非とも必要である。我々は凝縮体を記述するグロス-ピタエフスキー方程式の時間発展を数値的に解いて、この系に対する理解を深めることを本研究の目的とする。基本方程式の数値シミュレーションが可能になれば、渦糸ダイナミクスのみならず、これまでに報告されている、ソリトンや非線形局在モード等な非線形波動モード、さらに、ブリーザーモード、四重極モードに代表される凝縮体表面の(線形)基本振動モードも統一的に理解できるため、ボーズアインシュタイン凝縮系の研究の進展に大いに役立てることができる。

系の巨視的波動関数 ψ に対するモデル方程式として、我々はグロス-ピタエフスキー方程式に現象論的散逸効果を加えた方程式、

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

を元にして考察をおこなうことにする [3]。ここで、トラップポテンシャルは

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

で与えられ L^z は z 軸周りの角運動量 $L^z = -i\hbar(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x})$ である。 γ は散逸係数、 Ω は回転角速度であり、化学ポテンシャル μ は系の全粒子数 ($N_{tot} = \int |\Psi| dr$) が変化しないように

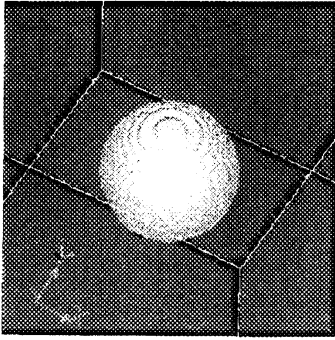


Fig.1(a) T=0.0

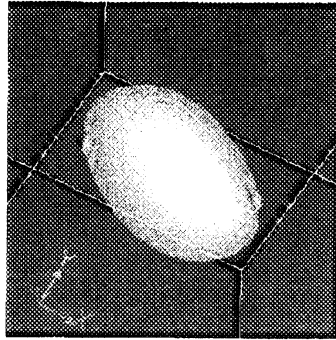


Fig.1(b) T=36.0

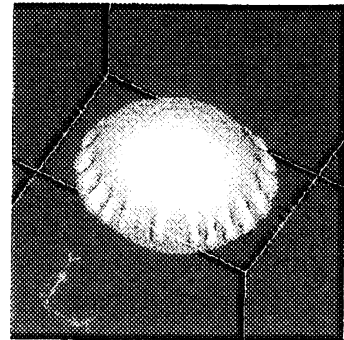


Fig.1(c) T=72.0

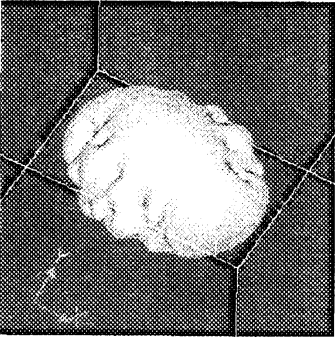


Fig.1(d) T=108.0

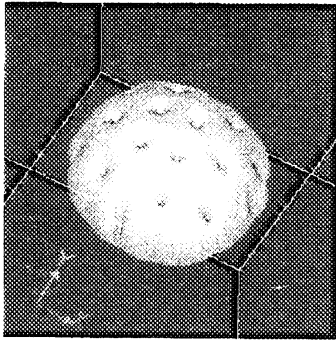


Fig.1(e) T=180.0

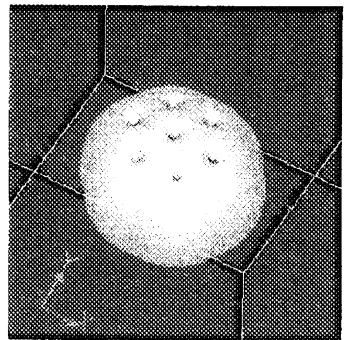


Fig.1(f) T=396.0

図 1: 凝縮体の時間発展の様子 ($|\psi| = 0.05$ をプロット)

時々刻々変化させることとする。 $\epsilon_x, \epsilon_y, \lambda$ はトラップポテンシャルの異方性を表すパラメータで参考文献 [3] から、 $\epsilon_x = 0.03, \epsilon_y = 0.09, \lambda = 1.0$ としている。方程式 (1) を数値的に解くことで渦の生成、相互作用、格子状態等の様々なダイナミクスを再現することができる。但し、これまで方程式 (1) に対し、主に空間 2 次元の数値シミュレーションが行われてきたのみで、明らかになっている現象も限定的である。そこで我々は splitting-Fourier 法を用いることで [4]、方程式 (1) に対する、3 次元数値シミュレーションを行いこれまで明らかにされていなかった量子渦系の 3 次元的ダイナミクスを明らかにしたい。

2 数値解法

ここでは、方程式 (1) に対する数値解法について考察する。方程式 (1) は $\gamma = 0$ 場合、ハミルトン系となるので Symplectic-Fourier 法を適用することができる。1 次元系では非線形シュレーディンガー方程式に対して Symplectic-Fourier 法が計算精度、効率ともに非常に優れた数値計算法であることがわかっている [5,6]、3 次元系でも $\gamma = 0$ の場合には Symplectic-Fourier 法を用いるのが良い。但し、 $\gamma \neq 0$ の場合はハミルトン系ではないので Symplectic 法を適用することができない。そこで形式的に全く同じ splitting-Fourier 法を用いて数値計算をおこなうことにする。

まず、方程式 (1) を適当にスケールした後、形式的に

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = L\psi \quad [L = -\gamma_0 \{ (\partial_x - iA_x)^2 + (\partial_y - iA_y)^2 + \partial_z^2 \}] \quad (3)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = N\psi \quad [N = \gamma_0 \{ V'_{tr} - \mu + g|\psi| \}] \quad (4)$$

と分割する。ここで、

$$V'_{tr} = [(1 - \Omega^2 + \epsilon_x)x^2 + (1 - \Omega^2 + \epsilon_y)y^2 + \lambda z^2]/4 \quad (5)$$

で与えられ、 $\gamma_0 = (i - \gamma)^{-1}$, $A_x = -\Omega y/2$, $A_y = \Omega x/2$ である。方程式 (3) 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), (4) を使って Δt 時間発展させることをそれぞれ $S_L(\Delta t)$, $S_N(\Delta t)$ と表記する。方程式 (3) は線形方程式であるから FFT を使って解くことができる。一方、方程式 (4) 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、

$$\psi(\Delta t) = S_L(\Delta t)S_N(\Delta t)\psi(0) \quad (6)$$

と与えられる。さらに、2 次の数値解法の公式は、

$$\psi(\Delta t) = S_N(\Delta t/2)S_L(\Delta t)S_N(\Delta t/2)\psi(0) \quad (7)$$

で与えられる。必要があれば、4 次の数値解法の公式も、

$$\begin{aligned} \psi(\Delta t) &= S_{4th}(\Delta t)\psi(0) \\ &= S_{2nd}(q\Delta t/2)S_{2nd}((1-2q)\Delta t)S_{2nd}(q\Delta t)\psi(0) \end{aligned} \quad (8)$$

として得られる [7]。但し、 $S_{2nd}(\Delta t)$ とは公式 (7) 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 (7) を用いて計算を行っている。

3 数値計算結果

本節で、典型的な数値シミュレーション結果について報告する。時空間メッシュの大きさは $\Delta t = 0.01$, $\Delta x = \Delta y = 0.25$, $\Delta z = 0.5$ ($N_x = N_y = 128$, $N_z = 64$) とし、各パラメータの値は $\gamma = 0.03$, $g = 2.0$ とする。初期波形としては、全粒子数 10^5 に対応した等方的な分布を与えておく。そのとき最初は $\Omega = 0.0$ としておいて、ある時刻 ($T=4.0$) から $\Omega = 0.75$ という回転を突然与える。このときの典型的な時間発展の様子を図 1 に示した。これらの図は波動関数の $|\psi| = 0.05$ となる等値面をプロットしたもので、ほぼトーマス-フェルミ端を示していると考えてよい。Fig.1(a) は初期状態を表しており、その後 (b) では回転の効果で凝縮体に変形している様子が見える。さらに (c) では凝縮体の表面波が不安定になり、その後渦が侵入し始める。渦の侵入は等方的に入るわけではなく、最初はある部分から侵入し別の場所から出て行くという、周期的な運動状態を続ける。その後、周期的な運動はなくなり、(d) に見られるような、渦が複雑に衝突する状態に遷移する。その状態を経つつ、渦が次第に凝縮体の中心に到達するようになり (e)、渦の数も減少する。最後に (f) のような渦糸格子状態になって定常状態になる。

この時間変化を別の角度から考察するため系の全エネルギー

$$E = \int d\mathbf{r} \left\{ \psi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \Omega L^z \right] \psi + V_{tr} |\psi|^2 + \frac{g}{2} |\psi|^4 \right\} \quad (9)$$

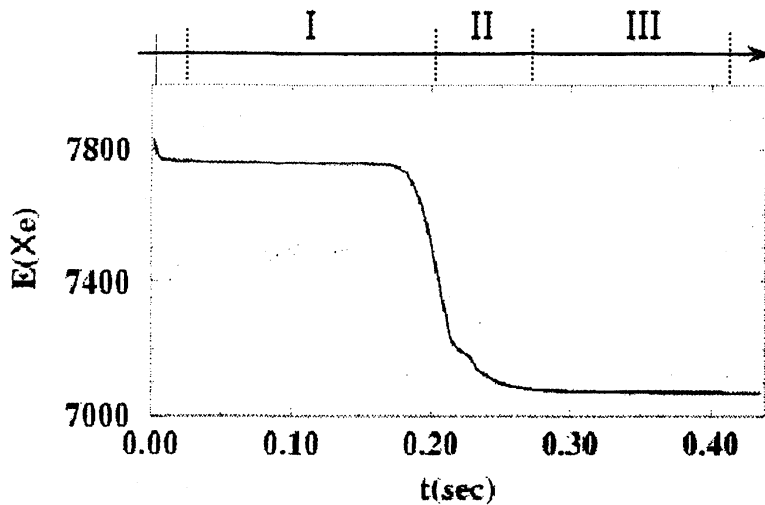


図 2: エネルギーの時間変化

の時間変化を見てみよう。図 2 はエネルギーの変化を描いたものである。この系は、全粒子数を保存させるために μ を時間変化させているため、単純なエネルギー散逸系ではないが、基本的な傾向として、エネルギーは減衰している。しかも、図 2 で示した様に大まかには、I, II, III の 3 つの領域に分けることができる。領域 I, III ではエネルギーは比較的ゆっくり減衰しており、領域 II では急激に減衰している。領域 I は凝縮体表面に二重極モードや四重極モード等の基本振動モードが励起されている状態で、最終的には Fig1.(c) の様に多重極モードが不安定になって、渦が侵入する直前までの状態に対応している。図 3 が領域 I の拡大図である。挿絵 (a), (b) はそれぞれエネルギーが極小、極大になっているときの状態に対応している。また挿絵 (c) は Fig1.(c) に対応する図である。領域 II は渦が侵入し複雑に運動する状態に対応しており、渦の侵入によってエネルギーが大きく減衰している。図 1 では、Fig1.(d), (e) に対応する領域である。最後の領域 III は基本的には渦系格子を組んでいるが、表面波モードや格子振動モードが残っており、それらの振動が徐々に減衰する過程に対応している。図 4 が領域 III の拡大図で、いくつかの振動状態に対応したエネルギーの極小、極大を繰り返しながら、エネルギーが散逸して行き、最終的に一定値に近付いていく様子がわかる。

5 まとめ

本稿では、希薄中性原子気体のボーズ-アインシュタイン凝縮系を記述するグロス-ピタエフスキー方程式 (1) の 3 次元数値シミュレーションを行って、量子渦系ダイナミクスを考察した。本研究で考察した系は、Z 軸周りに回転をさせて量子渦系を生成する系であるから、X-Y 平面に対する 2 次元数値シミュレーションで十分とする考え方もある。しかし、数値シミュレーションの結果を見ると、量子渦系は Z 軸方向にまっすぐになっているわけではなく、3 次元的に曲りくねって、相互作用をしていることがわかった。渦系格子に到るダイナミクスは 3 次元的で複雑かつ多岐にわたるため、2 次元と 3 次元とは全く異なった

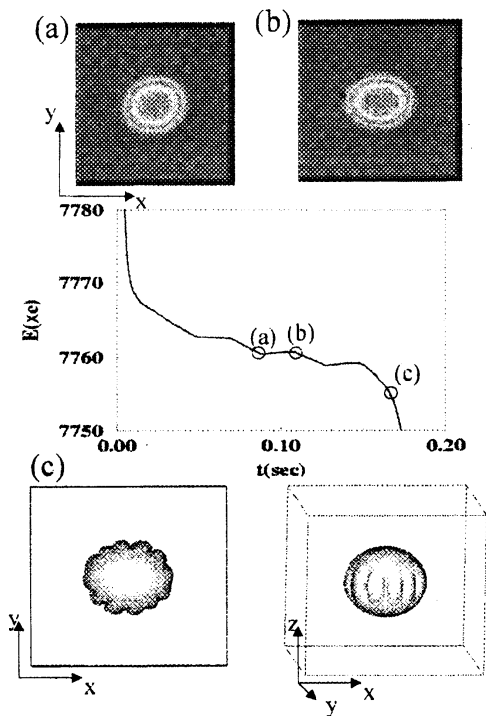


図 3. 領域 I の拡大図

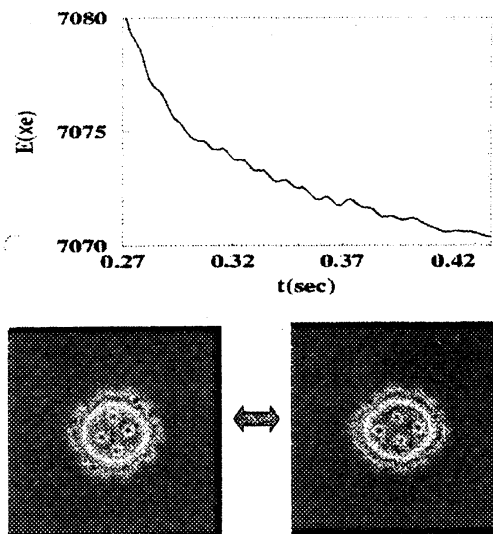


図 4. 領域 III の拡大図

結果になることが判明した。このことだけでも、3次元数値シミュレーションを行う意義があったと考えられる。

比較的大きな時空間メッシュで安定な3次元数値シミュレーションが可能になったのは、splitting-Fourier法の卓越した計算精度、安定性に依るところが大きい。この方法のさらに優れているところは用意する配列が変数の数だけで良いので、メモリーが少なく済むところである。例えば、同じ計算を(4次の)Runge-Kutta法で行なうとすると、3倍のメモリーが必要になる。これは計算が大規模になればなるほどその差が歴然としてくるものである。

今後は様々な実験条件に即した数値シミュレーションを行なって行かねばならないが、実験状況を再現するという意味では3次元数値シミュレーションは必要不可欠になると考えられる。多成分系やフェルミオン系など興味深い系がいくつもあるが、本稿で用いたsplitting-Fourier法を発展させつつ、物理的にも重要な系の数値シミュレーションを行なって新たな現象を解明していくのが今後の課題である。

参考文献

- [1] M. Anderson, J. Ensher, M. Matthews, C. Wieman and E. Cornell, *Science* **269** (1995) 198.
- [2] K. Madison, F. Chevy, W. Wohlleben and J. Dalibard, *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000) 806.
- [3] M. Tsubota, K. Kasamatsu and M. Ueda, *Phys. Rev. A* **65** (2002) 023603.
- [4] 佐々 成正, 数理解析研講究録 **1271** (2002) 240.

- [5] 佐々 成正, 吉田春夫, 非線形 Schrödinger 方程式に対する symplectic 数値解法応用数理
10 No.2 (2000) 119-131.
- [6] 西成活裕, 佐々 成正可積分系の応用数理 (第二章) (2000, 裳華房, 東京)
- [7] H. Yoshida, *Phys. Lett.* **A150** (1990) 262-268.