

修士論文 (2007年度)

中性原子 Bose-Einstein 凝縮体における不安定性の解析

早稲田大学大学院理工学研究科 山中由也研究室 中村 祐介¹

目次

1 緒言	722
2 中性原子気体による Bose-Einstein 凝縮	725
2.1 作用とハミルトニアン	725
2.2 大域的位相変換対称性とその破れ	726
2.3 Gross-Pitaevskii 方程式と Bogoliubov-de Gennes 方程式	727
2.4 定常状態における凝縮体の振る舞い	728
3 Bogoliubov-de Gennes 方程式における複素固有値出現条件	730
3.1 複素固有値が存在しない場合の固有関数の性質	730
3.2 複素固有値が存在する場合の固有関数の性質	734
3.3 Bogoliubov-de Gennes 方程式に対する摂動計算	735
3.4 全ての 0 次の固有値が実数の場合の摂動計算	737
3.5 複素固有値出現条件	742
3.6 0 次に複素固有値が存在する場合の摂動論	742
4 多重渦度を持つ凝縮体の不安定性	746
4.1 0 次及び 1 次の方程式	746
4.2 永年方程式の分解	748
4.3 複素固有値出現条件	751
5 光学格子中を流れる凝縮体の不安定性	752
5.1 光学格子中を流れる凝縮体に対する Bogoliubov-de Gennes 方程式	753
5.2 0 次及び 1 次の方程式	753
5.3 有効な縮退	757
5.4 複素固有値出現条件	758
6 まとめと展望	761

¹E-mail: yusuke.n@asagi.waseda.jp

付録 A Bogoliubov–de Gennes の方法による非摂動ハミルトニアンに対角化	762
A.1 複素固有値が存在しない場合	762
A.2 複素固有値が存在する場合	764
付録 B Rossignori–Kowalski の方法による非摂動ハミルトニアンに対角化	766
B.1 Rossignori–Kowalski の方法	766
B.2 Bogoliubov–de Gennes の方法との同等性	768

1 緒言

質量を持つ Bose 粒子集団をある温度以下に冷却すると、巨視的な数の粒子が 1 つの量子状態に落ち込む。この現象を Bose–Einstein 凝縮 (BEC)、基底状態を占めている巨視的な粒子集団を凝縮体と呼ぶ。粒子間相互作用のない気体による BEC の存在はすでに 1925 年に Einstein によって理論的に予言されていたが [1]、その理論が適用できる系を実験的に作り出すことは長らく不可能であった。例えば液体 ^4He の超流動 [2]、半導体中のエキシトンの凝縮現象 [3] などの本質は BEC によるものだが、この系においては粒子間相互作用が大きいなどの理由のため、理論計算と実験結果を比較することは困難である。

1995 年、中性原子気体による BEC が初めて実現された [4, 5, 6]。この系は、Doppler 効果を原理とするレーザー冷却により中性原子気体を冷却し、磁氣的・磁気光学的に空間的に閉じ込めた後、蒸発冷却を行い μK のオーダーまで冷却することにより実現する。このようにして作られた中性原子気体の BEC の特徴は、希薄かつ原子間相互作用が弱いという点である。実際、この系では相互作用の弱さのため絶対零度付近では殆ど全ての原子が 1 つの量子状態を占める。これは凝縮原子の割合がせいぜい 10% である液体 ^4He 超流動の系などとは対照的である。また外部ポテンシャルの形状、温度、相互作用の大きさなどを精度良く制御することができるため、理論と実験の詳細な比較が可能である。マクロな量子現象である BEC の性質を理解するに当たって、また量子多体系の理論の検証の場として、中性原子気体による BEC は大きな意味を持つ。そのため理論、実験ともに盛んに研究が行われている。

実験制御性の良さを示す例として、光学格子中の凝縮体についての実験がある。光学格子とは対向するレーザーによる定在波によって作られる周期的なポテンシャルであり、これにより格子欠陥の存在しない理想的な結晶を模することができる。そのため光学格子の系は固体物理等の理論の検証をするシミュレータとしての役割も期待される。これに関連して光学格子中の BEC における超流動–絶縁体転移 [7]、Bloch 振動 [8] などが報告されている。

また BEC の示す多彩な現象の 1 つに、凝縮体の渦がある。後述するが凝縮体を記述する秩序変数の 1 価性により、この渦は量子化されており、離散的な循環しか許されない。非対称な回転トラップを用いたり、「光スプーン」を用いて凝縮体をかき混ぜることにより、凝縮体に渦や渦格子を作ることができる [9, 10, 11, 12]。また位相幾何学的手法を用いて高次渦度の渦を作ることでもできる [13, 14]。

このように様々な理論・実験双方からの研究が行われているが、その中でも凝縮体の不安定性にかかわる研究が興味深い。凝縮体の不安定性への理解は、不安定系・非平衡系に対する量子多体理論の定式化へ足掛りになるであろう。有限温度の凝縮体では全ての原子が凝縮するわけではなく、その一部が熱的に励起している。もし凝縮体に負の励起モードが存在する場合、非凝縮相がエネルギー的な散逸機構の役割を果たし、その結果として凝縮体が不安定性を示すことがある [15]。このような機構による凝縮体の不安定性のことを Landau 不安定性という。しかし非凝縮の熱浴としての効果が無視できるほどの極低温でも、渦度 2 の渦を持つ凝縮体における渦の分裂 [14]、凝縮体が光学格子中を流れる場合の凝縮体の崩壊 [16]、反強磁性のスピンル BEC における磁区構造の崩壊 [17] など凝縮体の不安定性が報告されている。これらの現象はエネルギー的な散逸機構を必要としない不安定性であり、動的不安定性 (dynamical instability) と呼ばれる。

凝縮体の不安定性を記述する方程式として Bogoliubov-de Gennes (BdG) 方程式 [18, 19, 20] がある。BdG 方程式は凝縮体を記述する時間依存 Gross-Pitaevskii (TDGP) 方程式 [21] の定常状態からの線形の変位が従う方程式として導出され、その固有値は凝縮体の励起スペクトルを決定する。BdG 方程式の固有値は複素数になる場合があり、複素固有値の出現は凝縮体の動的不安定性を表していると解釈される。凝縮体が高次渦度を持つ場合 [22, 23, 24]、凝縮体が光学格子中を流れる場合 [25, 26] において BdG 方程式に複素固有値が現れることが数値計算により確認されている。またその他にも数値計算により、ギャップソリトンがある場合 [27] や多成分 BEC の場合 [28, 29, 30] などについても、BdG 方程式に複素固有値が現れることが報告されている。また Taylor 等 [31] は凝縮体が光学格子中を流れる場合に関して、Skryabin [32] は 2 成分 BEC が渦を持つ場合に関して、解析的な研究を行った。

凝縮体が光学格子中を流れる系において、Wu 等 [25, 26] の BdG 方程式による動的不安定性の解析は実験 [16] を良く説明できている。一方凝縮体が渦を持つ場合、TDGP 方程式や BdG 方程式による解析が実験を説明できるのかどうかは自明ではなかった。Shin 等 [14] の実験において渦は相互作用定数の値に依らず分裂したにもかかわらず、Pu 等 [22] の BdG 方程式に関する数値計算では複素固有値は相互作用定数に関して周期的に出現したためである。しかしこれは Pu 等は計算を 2 次元系に限って行っていたためであった。3 次元系では BdG 方程式による結果は実験と矛盾しない [24]。また実験状況を忠実に再現した 3 次元 TDGP を数值的に解くことにより、Shin 等の結果を良く再現できることが報告されている [33, 34]。このように BdG 方程式や TDGP 方程式を用いた解析は、実験結果を説明することができると考えられている。

一方、動的不安定性に対する別の手法が Rossignoli と Kowalski [35] によって定式化された。ここではその方法を RK の方法と呼ぶことにする。RK の方法では生成消滅演算子による 2 次形式のハミルトニアンを考える。動的不安定性を示す複素モードはハミルトニアンの対角化の際に現れる。この時ハミルトニアンを対角化する演算子は生成消滅演算子の代数に従わない。なお実モードや複素モードに関して、RK の方法と BdG の方法が同等であることが示されている [36]。我々の研究グループは以前、凝縮体が高次渦度を持つ場合について、RK の方法を用いて解析的に複素モード出現条件を導出した [37]。この解析ではハミルトニアンのモードを 2 つに限る 2 モード近似が本質

的であった。2モード近似の妥当性を示すために3モード目を取り入れた計算を行い、3モード目が複素モード出現条件に影響を与えないことの確認を行ったが、何故3モード目が効かず、2モード近似が有効であるかまでは明らかにすることができなかった。

本論文ではBdG方程式における複素固有値出現条件を、摂動計算を行うことによってモデルによらず解析的に導出する。この方法は先行研究[31, 32]に対する単なる一般化だけではなく、より簡潔な定式化になっている。またこの方法を具体的なモデルに適応し複素固有値出現条件を導出し、中性原子BECにおける不安定性解析を行う。得られた結果は数値計算による結果を再現する。

本論文は以下のように構成される。

第2章では捕捉された中性原子気体の作用を与え、ハミルトニアンを導出する。続いて中性原子気体のBECを扱うために、自発的対称性の破れの機構を通して凝縮体を記述する秩序変数を与える。次に凝縮体に従う方程式であるTDGP方程式、定常状態に対するGross-Pitaevskii (GP)方程式[38]、及び凝縮体の定常状態からの微小変位を記述する固有値方程式であるBdG方程式を導出する。最後に凝縮体が渦を持つ場合、及び凝縮体が光学格子中を流れる場合における凝縮体の振る舞いを整理する。

第3章ではBdG方程式に対する摂動計算を行うことで複素固有値出現条件を導出し、本論文の主題である中性原子BECにおける不安定性の解析を行う。BdG方程式が持つ対称性に注目し、固有関数間に不定計量の内積を定義する。BdG方程式の0でない実固有値に属する固有関数は、この不定計量のもとでノルムが正のものと負のものに分類できる。BdG方程式に対する摂動計算を定式化することで、正ノルムと負ノルムの固有関数間の縮退が複素固有値出現に必要であるということを示す。前述したBdG方程式に関する数値計算においてもこの特別な縮退が重要であることが示唆されていた。またTaylor等[31]は光学格子の強さ $v=0$ 周りの、Skryabin[32]は相互作用定数 $g=0$ 回りの摂動計算をそれぞれ行い、この特別な縮退の必要性が示した。しかしこれらはあくまで特定のモデルに対する研究であり、これまでモデルによらない解析は行われてこなかった。本論文で展開する方法は摂動させるパラメータの種類、非摂動パラメータの値によらない解析であるだけでなく、より簡潔な定式化となっている。

第4章では円筒対称な調和振動子型ポテンシャルに捕捉された渦度 κ の量子渦を持つ凝縮体を考える。第3章にて定式化した手法を適応し相互作用 $g=0$ 周りの摂動展開を行うことで、相互作用が小さい極限における複素固有値出現条件を導出する。さらにこの解析を通して、我々の以前の研究[37]における2モード近似の妥当性を確認し、何故2モード近似が有効であったかを示す。

第5章も第3章で定式化した手法の応用である。第5章では光学格子中を流れる1次元系の凝縮体を考える。光学格子の強さ $v=0$ 周りの摂動展開を行うことで、光学格子が弱い極限における複素固有値出現条件を求め、Wu等による数値計算、Taylor等による解析計算の結果を再現する。

第6章では本論文を総括し、今後の展望を述べる。

付録A, 付録Bではハミルトニアンを対角化する方法の1つであるBdGの方法とRKの方法についてそれぞれ紹介する。

2 中性原子気体による Bose-Einstein 凝縮

この章では中性原子気体の BEC を理論的に記述するための枠組みを与える。まず捕捉された中性原子気体を記述する作用を与え、場のハミルトニアンを導出する。続いて中性原子気体の BEC を理論的に扱うために、自発的対称性の破れの機構を通して凝縮体を記述する秩序変数を与える。またこの秩序変数が従う方程式である GP 方程式を導く。続いて BdG 方程式を TDGP 方程式より導き、その複素固有値の存在が凝縮体の動的不安定性を表していることを示す。最後に凝縮体が渦を持つ場合、及び凝縮体が光学格子中を流れる場合における凝縮体の振る舞いを整理する。

2.1 作用とハミルトニアン

捕捉された希薄な中性原子気体を記述するラグランジアン密度 $\mathcal{L}$ 、作用 S を

$$\mathcal{L} = \Psi^\dagger(x)(T - K - V + \mu)\Psi(x) - \frac{g}{2}\Psi^\dagger(x)\Psi^\dagger(x)\Psi(x)\Psi(x), \quad (2.1)$$

$$S = \int d^4x \mathcal{L}, \quad (2.2)$$

と与える。ここで $x = (\mathbf{x}, t)$, $T = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$, $K = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2$, $V = V(\mathbf{x})$ であり、 M は原子の質量、 μ は化学ポテンシャルである。なお系は十分希薄かつ極低温ため原子間相互作用は2体の接触型相互作用で良く記述できる [39]。ここで相互作用定数 g は $g = 4\pi\hbar^2 a/M$ である。ただし a は s 波散乱長である。

$\Psi(x)$ に共役な量 $\Pi(x)$ を

$$\Pi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}} = i\hbar \Psi^\dagger(x), \quad (2.3)$$

で定義し

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\Pi}(\mathbf{x}', t)] = i\hbar \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (2.4)$$

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\Psi}(\mathbf{x}', t)] = 0, \quad (2.5)$$

と量子化条件を課す。交換関係 (2.4) の $\hat{\Pi}$ を $\hat{\Psi}^\dagger$ に書き換えれば

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}', t)] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (2.6)$$

となっている。ハミルトニアン $\hat{H}$ は

$$\hat{H} = \int d^3x \left[\hat{\Psi}^\dagger(x)(K + V - \mu)\hat{\Psi}(x) + \frac{g}{2}\hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}(x)\hat{\Psi}(x) \right], \quad (2.7)$$

となる。

2.2 大域的位相変換対称性とその破れ

ハミルトニアン $\hat{H}$ は大域的位相変換

$$\hat{\Psi}(x) \longrightarrow e^{i\eta} \hat{\Psi}(x), \quad (2.8)$$

$$\hat{\Psi}^\dagger(x) \longrightarrow e^{-i\eta} \hat{\Psi}^\dagger(x), \quad (2.9)$$

に対して不変である。この変換の生成子は

$$\hat{N}(t) = \int d^3x \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x), \quad (2.10)$$

である。ここで $\hat{N}(t)$ とハミルトニアンは交換する。つまり $\hat{N}(t) = \hat{N}$ は時間に依存しないことが示される。また $\hat{N}$ は確かに上記の大域的位相変換を引き起こすことが確認できる：

$$e^{i\eta \hat{N}} \hat{\Psi}(x) e^{-i\eta \hat{N}} = e^{i\eta} \hat{\Psi}(x). \quad (2.11)$$

通常の原子気体の系ではハミルトニアン $\hat{H}$ は場の大域的位相変換に対して対称であり、物理量は位相の取り方によらない。一方 BEC が実現した場合では位相変換に対する対称性が自発的に破れ、位相が確定すると考えられている。凝縮体の干渉実験などを通して、中性原子気体の BEC で位相が確定した状況が実現されていることが確認されている [40, 41, 42]。

BEC の実現した真空を $|\Omega\rangle$ とする。ここで $|\Omega\rangle$ は位相変換に対して対称ではない：

$$e^{i\eta \hat{N}} |\Omega\rangle \neq |\Omega\rangle. \quad (2.12)$$

つまり $\hat{N}$ は真空を消去しない：

$$\hat{N} |\Omega\rangle \neq 0. \quad (2.13)$$

$\hat{N}$ が真空を消去する場合、場の演算子 $\hat{\Psi}(x)$ は真空期待値を持ち得ない。一方 $\hat{N}$ が真空を消去しない場合、 $\hat{\Psi}(x)$ は真空期待値を持つことができる：

$$\langle \Omega | \hat{\Psi}(x) | \Omega \rangle = \xi(\mathbf{x}). \quad (2.14)$$

ただし真空期待値 $\xi(\mathbf{x})$ は時間に依存しないものと仮定した。この真空期待値が凝縮体を記述する秩序変数となる。 $|\xi(\mathbf{x})|^2$ は凝縮原子密度、その空間積分は凝縮原子数 N_c と解釈される。

場の演算子 $\hat{\Psi}(x)$ を以下のように凝縮相と非凝縮相に分割する：

$$\hat{\Psi}(x) = \xi(\mathbf{x}) + \hat{\phi}(x). \quad (2.15)$$

$\hat{\Psi}(x)$ の交換関係 (2.6) より、 $\hat{\phi}(x)$ の交換関係は

$$[\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}', t)] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (2.16)$$

$$[\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{\phi}(\mathbf{x}', t)] = 0, \quad (2.17)$$

と定まる. また $\hat{\varphi}(x)$ の真空期待値は 0 である :

$$\langle \Omega | \hat{\varphi}(x) | \Omega \rangle = 0. \quad (2.18)$$

$\hat{\Psi}(x)$ で書かれたハミルトニアン (2.7) を以下のように $\hat{\varphi}(x)$ で書き直す.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I, \quad (2.19)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = \int d^3x \left[\hat{\varphi}^\dagger(x) \left(K + V - \mu + 2g|\xi(x)|^2 \right) \hat{\varphi}(x) \right. \\ \left. + \frac{1}{2}g \left(\xi^{*2}(x) \hat{\varphi}(x) \hat{\varphi}(x) + \xi^2(x) \hat{\varphi}^\dagger(x) \hat{\varphi}^\dagger(x) \right) \right], \end{aligned} \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_I = \int d^3x \left[\xi^*(x) \left(K + V - \mu + g|\xi(x)|^2 \right) \hat{\varphi}(x) + \hat{\varphi}^\dagger(x) \left(K + V - \mu + g|\xi(x)|^2 \right) \xi(x) \right. \\ \left. + g\xi(x) \hat{\varphi}^\dagger(x) \hat{\varphi}^\dagger(x) \hat{\varphi}(x) + g\xi^*(x) \hat{\varphi}^\dagger(x) \hat{\varphi}(x) \hat{\varphi}(x) + \frac{1}{2}g \hat{\varphi}^\dagger(x) \hat{\varphi}^\dagger(x) \hat{\varphi}(x) \hat{\varphi}(x) \right]. \end{aligned} \quad (2.21)$$

ただし場の演算子 $\hat{\varphi}(x)$ の 2 次形式になっている部分を非摂動部 $\hat{H}_0$, それ以外を摂動部 $\hat{H}_I$ とした. このハミルトニアンは場の演算子 $\hat{\varphi}(x)$ の大域的位相変換に対して不変ではない.

2.3 Gross-Pitaevskii 方程式と Bogoliubov-de Gennes 方程式

本節では秩序変数 $\xi(x)$ が従う方程式である GP 方程式, 凝縮体の定常状態からの微小変位を記述する方程式である BdG 方程式を導出する.

$\hat{\Psi}(x)$ の時間発展は Heisenberg 方程式より

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(x) &= [\hat{\Psi}(x), \hat{H}] \\ &= (K + V - \mu + g\hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}(x)) \hat{\Psi}(x), \end{aligned} \quad (2.22)$$

で与えられる. ここで非凝縮相の効果が十分に小さいとして無視し, 場の演算子 $\hat{\Psi}(x)$ を c 数 $\Psi(x)$ に置き換えれば, TDGP 方程式を得る :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x) = (K + V - \mu + g|\Psi(x)|^2) \Psi(x). \quad (2.23)$$

さらに定常状態を考え $\Psi(x) = \xi(x)$ と置き, 時間に依存しない GP 方程式を得る :

$$(K + V - \mu + g|\xi(x)|^2) \xi(x) = 0. \quad (2.24)$$

GP 方程式は極低温の凝縮体の実験を良く再現することが分かっている.

続いて TDGP 方程式 (2.23) を用いて, 定常解からの微小な変位の時間発展を調べる. $\Psi(x) = \xi(x) + \delta\Psi(x)$ とし $\delta\Psi(x)$ に関して 2 次以上の項を落とすと

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \delta\Psi(x) = [K + V - \mu + 2g|\xi(x)|^2] \delta\Psi(x) + g\xi(x)^2 \delta\Psi^*(x), \quad (2.25)$$

を得る. さらに

$$\delta\Psi(\mathbf{x}, t) = u_n(\mathbf{x})e^{-iE_n t/\hbar} + v_n^*(\mathbf{x})e^{iE_n^* t/\hbar}, \quad (2.26)$$

と変数分離することにより, BdG 方程式を得る:

$$T\mathbf{y}_n(\mathbf{x}) = E_n\mathbf{y}_n(\mathbf{x}). \quad (2.27)$$

ここで

$$T = \begin{pmatrix} \mathcal{L} & \mathcal{M} \\ -\mathcal{M}^* & -\mathcal{L} \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

$$\mathbf{y}_n(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} u_n(\mathbf{x}) \\ v_n(\mathbf{x}) \end{pmatrix}, \quad (2.29)$$

と 2 重項表示を導入した. また

$$\mathcal{L} = K + V - \mu + 2g|\xi(\mathbf{x})|^2, \quad (2.30)$$

$$\mathcal{M} = g\xi(\mathbf{x})^2, \quad (2.31)$$

と置いた.

BdG 方程式の固有値 E_n は微小変位に対する固有“振動数”を表すが, 行列 T がエルミートではないため, これは実数とは限らない. 式 (2.26) から読み取られるように, 固有値 E_n が複素数になれば $\delta\Psi(\mathbf{x})$ は指数関数的に増減する. これは定常状態における凝縮体の密度分布 $|\xi(\mathbf{x})|^2$ が崩れることを意味し, このため BdG 方程式における複素固有値の存在は凝縮体の動的不安定性を表していると解釈される [22, 23, 25]. 従って BdG 方程式を解き, 複素固有値の存在を確認することにより凝縮体の動的不安定性を議論することができる.

BdG 方程式の性質については 3 章にて詳しく述べる.

2.4 定常状態における凝縮体の振る舞い

本節では定常状態の凝縮体の振る舞いについて述べる. まず TDGP 方程式から導かれる連続の方程式を用いて, 凝縮体の速度を定義する. さらに凝縮体が渦を持つ場合について, 凝縮体が光学格子中を流れる場合について詳しく調べ, その振る舞いを整理する.

TDGP 方程式 (2.23) より, 凝縮体の密度 $n_c(\mathbf{x}) = |\Psi(\mathbf{x})|^2$ は

$$\frac{\partial}{\partial t}n_c(\mathbf{x}) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}) = 0, \quad (2.32)$$

と連続の方程式を満足する. ただし凝縮体の密度流 $\mathbf{j}(\mathbf{x})$ を

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = \frac{\hbar}{2iM} \left(\Psi^*(\mathbf{x})\nabla\Psi(\mathbf{x}) - \Psi(\mathbf{x})\nabla\Psi^*(\mathbf{x}) \right), \quad (2.33)$$

で定義した. 特に凝縮体が時間依存せず $\Psi(\mathbf{x}) = \xi(\mathbf{x})$ となっている場合は $\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}) = 0$ である. 凝縮体の速度 $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ をこの密度流を使って

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = n_c(\mathbf{x})\mathbf{v}(\mathbf{x}), \quad (2.34)$$

と定義する. ここで GP 方程式の解 $\xi(\mathbf{x})$ を凝縮体の密度 $n_c(\mathbf{x})$ と位相 $S(\mathbf{x})$ に分けて

$$\xi(\mathbf{x}) = \sqrt{n_c(\mathbf{x})}e^{iS(\mathbf{x})}, \quad (2.35)$$

と書くと, 凝縮体の密度流は

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = n_c(\mathbf{x})\frac{\hbar}{M}\nabla S(\mathbf{x}), \quad (2.36)$$

となる. 従って凝縮体の速度は位相の勾配で表される:

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \frac{\hbar}{M}\nabla S(\mathbf{x}). \quad (2.37)$$

2.4.1 渦を持つ凝縮体

位相 $S(\mathbf{x})$ が特異点を持たない限り, 凝縮体の速度のポテンシャル性 (2.37) より $\nabla \times \mathbf{v}(\mathbf{x}) = 0$ が成り立ち, 凝縮体は非回転的であることが分かる. 凝縮体が渦を持つときその位相には特異点が存在しなくてははいけない.

さらに $\xi(\mathbf{x})$ の一価性より, 閉経路に沿った位相の変化は 2π の整数倍に限られる. 従って循環 Γ は

$$\Gamma = \oint \mathbf{v} \cdot d\mathbf{l} = \frac{2\pi\hbar}{M}\kappa, \quad (2.38)$$

と $2\pi\hbar/M$ を単位として量子化されていることが分かる. ただし κ は整数である.

ここで円筒対称なトラップに捕捉された定常状態の凝縮体が軸中心に渦を持つ場合を考える. 凝縮体の回転対称性を仮定すると, 位相 S は円筒座標系 (r, θ, z) で $S = \kappa\theta$ となり, 軸周りの回転の速さは $v_\theta = \frac{\hbar}{Mr}\kappa$ となる. 従って $\kappa \neq 0$ の場合, 軸上 $r = 0$ において速度は発散し, 位相は特異点を持つ. これより $r = 0$ において $\xi = 0$ でなくてははいけないことが分かる. そうであれば位相の特異点は運動エネルギーの発散を引き起こさない. このようにして凝縮体は渦を持つことができる. 整数 κ は渦の循環を決めるものであり, 渦度と呼ばれる. 特に円筒対称なトラップポテンシャルに捕捉されている凝縮体がトラップポテンシャルの軸中心に渦を 1 つ持ち, 定常状態である場合, GP 方程式の解 ξ は

$$\xi(r, \theta, z) = \sqrt{\frac{N}{2\pi}}e^{i\kappa\theta}f(r, z), \quad (2.39)$$

と変数分離することができる. $\kappa \neq 0$ のとき $f(r, z)$ には $r = 0$ 周りの境界条件

$$\lim_{r \rightarrow 0} f(r, z) = 0, \quad (2.40)$$

が課される. 言い換えれば, 渦の中心では凝縮体の密度は 0 でなくてはならない.

2.4.2 光学格子中を流れる凝縮体

ここでは簡単のため、議論を1次元に限る。本節の議論は容易に3次元に拡張することができる。なお、本論文では光学格子に関する議論は全て1次元でしか行わない。

位相の揃った波長 λ のレーザーを対向させると定在波を作ることができ、凝縮体はこの定在波の作る周期 $d = \lambda/2$ の電場を感じる。つまりレーザーにより周期的なポテンシャル

$$V(x) = v \cos Gx, \quad (2.41)$$

を作り出すことができる。このような周期的なポテンシャルのことを光学格子と呼ぶ。ここで v は光学格子ポテンシャルの強さ、 G は単位逆格子ベクトルであり、格子間隔 d を使って $G = 2\pi/d$ と表される。凝縮体の密度 $n_c(x)$ が格子間隔 d に対して、周期的であるとする。このときGP方程式の解 $\xi(x)$ は以下のBloch条件に従う[31]：

$$\xi(x) = e^{ikx} \xi_k(x), \quad (2.42)$$

$$\xi_k(x) = \xi_k(x + d). \quad (2.43)$$

ここで $k = 2\pi\ell/L$ である。ただし L は系の大きさ、 ℓ は整数である。 $\xi_k(x)$ の位相を $S_k(x)$ と書くことにすると、凝縮体の速度 $v(x)$ は

$$v(x) = \frac{\hbar}{M} \left(k + \frac{d}{dx} S_k(x) \right), \quad (2.44)$$

となる。従って k は凝縮体の平均的な速度 $\hbar k/M$ を与える。

3 Bogoliubov–de Gennes 方程式における複素固有値出現条件

この章ではBdG方程式に対する摂動計算を行うことで、正ノルムと負ノルムの固有関数による縮退が複素固有値を引き起こしていることをモデルによらずに示し、複素固有値が出現するための条件を解析的に導出する。

しかし解析的な議論の前に、BdG方程式の固有関数の性質を詳細に調べることが必要となる。BdG方程式の非エルミート性、それによって許される複素固有値の存在などのため、BdG方程式の固有関数の性質は自明ではない。まずは固有関数の規格化、直交性を調べなくてはならない。このような議論は一般的な系では文献[43]にて、特定の系では文献[23, 32, 44]などにて行われている。固有関数の性質を整理した後、適切な完全系を用意し、BdG方程式に対する摂動計算を定式化する。

3.1 複素固有値が存在しない場合の固有関数の性質

ここではBdG方程式に複素固有値が存在しない場合を考える。BdG方程式が複素固有値を持つ場合の議論は次節で行う。

3.1.1 固有関数の規格化と直交性

BdG 方程式 (2.27) :

$$T\mathbf{y}_n(\mathbf{x}) = E_n\mathbf{y}_n(\mathbf{x}), \quad (3.1)$$

$$T = \begin{pmatrix} \mathcal{L} & \mathcal{M} \\ -\mathcal{M}^* & -\mathcal{L} \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

$$\mathcal{L} = K + V - \mu + 2g|\xi(\mathbf{x})|^2, \quad (3.3)$$

$$\mathcal{M} = g\xi(\mathbf{x})^2, \quad (3.4)$$

において, T の非エルミート性のため, 固有関数間には通常の意味での直交関係はない. そこで T が持つ対称性に注目し不定計量の内積を定義する. 不定計量の内積のもとで, 固有関数は直交系をなすことが示される.

まず T には

$$\sigma_1 T \sigma_1 = -T^*, \quad (3.5)$$

$$\sigma_3 T \sigma_3 = T^\dagger, \quad (3.6)$$

という対称性があることに注目する [43, 44]. BdG 方程式の解析において, この 2 つの対称性が重要である. ただし

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

である. 2 つの 2 成分量 $\mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{t}(\mathbf{x})$ 間に不定計量の内積を以下のように定義する.

$$(\mathbf{s}, \mathbf{t}) = \int d^3x \mathbf{s}^\dagger(\mathbf{x}) \sigma_3 \mathbf{t}(\mathbf{x}). \quad (3.8)$$

不定計量の内積 (3.8) のもとでは対称性 (3.6) により

$$\begin{aligned} (\mathbf{s}, T\mathbf{t}) &= (\mathbf{s}, \sigma_3 T^\dagger \sigma_3 \mathbf{t}) \\ &= \int d^3x \mathbf{s}^\dagger(\mathbf{x}) T^\dagger \sigma_3 \mathbf{t}(\mathbf{x}) \\ &= (T\mathbf{s}, \mathbf{t}), \end{aligned} \quad (3.9)$$

となり, T はこの不定計量内積のもとで擬エルミート性を示す.

またノルムを

$$\|\mathbf{s}\|^2 = (\mathbf{s}, \mathbf{s}) = \int d^3x \mathbf{s}^\dagger(\mathbf{x}) \sigma_3 \mathbf{s}(\mathbf{x}), \quad (3.10)$$

のように自分自身との内積で定義する. 不定計量 σ_3 のため, $\|\mathbf{s}\|^2$ は正とは限らず負にも 0 にもなり得ることに注意する. BdG 方程式の線形性より, 固有関数に 0 でない複素数 α を掛けることで規格化することができる. しかし

$$\|\alpha\mathbf{s}\|^2 = |\alpha|^2 \|\mathbf{s}\|^2, \quad (3.11)$$

となるため, 規格化によりノルムの 2 乗の符号を変えることはできない. つまり BdG 方程式の固有関数はそのノルムの 2 乗の符号によって正ノルム, 負ノルム, ゼロノルムと 3 種類に分類される.

$y_n(x)$, $y_m(x)$ はそれぞれ固有値 E_n , E_m に属する固有関数であるとする.

$$\begin{aligned} E_m(y_n, y_m) &= (y_n, T y_m) \\ &= (T y_n, y_m) \\ &= E_n(y_n, y_m), \end{aligned} \quad (3.12)$$

より

$$(E_m - E_n)(y_n, y_m) = 0, \quad (3.13)$$

である. つまり異なる固有値に属する固有関数は不定計量内積のもとで直交する. また Gramm-Schmidt の直交化法を用いることにより, 同じ固有値に属する固有関数でも互いに直交するようにとることができる.

また $y_n(x)$ が固有値 E_n に属する固有関数であるとする, 対称性 (3.5) より

$$\begin{aligned} T \sigma_1 y_n^*(x) &= -\sigma T^* y_n^*(x) \\ &= -E_n \sigma_1 y_n^*(x), \end{aligned} \quad (3.14)$$

が成り立つ. 従って

$$z_n = \sigma_1 y_n^*, \quad (3.15)$$

は固有値 $-E_n$ に属する固有関数であることが分かる. $z_n(x)$ の定義より

$$\|z_n\|^2 = -\|y_n\|^2, \quad (3.16)$$

である. つまり正ノルムの固有関数と負ノルムの固有関数はペアで現れる. これ以降は正ノルムの固有関数を $y_n(x)$, 負ノルムの固有関数を $z_n(x)$ と書くことにする. また $y_n(x)$ の固有値を E_n と書く. 従って $z_n(x)$ の固有値は $-E_n$ である. それぞれ規格化を行い, 以下の正規直交関係を得る.

$$(y_n, y_m) = \delta_{nm}, \quad (3.17)$$

$$(z_n, z_m) = -\delta_{nm}, \quad (3.18)$$

$$(y_n, z_m) = 0. \quad (3.19)$$

3.1.2 ゼロモードと完全系

BdG 方程式には次のゼロ固有値の固有関数を持つことが指摘されている [45, 46] :

$$y_0(x) = \begin{pmatrix} \xi(x) \\ -\xi^*(x) \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

$\mathbf{y}_0(\mathbf{x})$ が確かに BdG 方程式の固有関数であることは, GP 方程式 (2.24) と BdG 方程式 (2.27) から直ちに分かる. $\mathbf{y}_0(\mathbf{x})$ はゼロノルムであり, 自分自身を含めた全ての固有関数と直交してしまう. 従って BdG 方程式の固有関数だけでは完全系を張らない. そこで完全性を保証するために

$$\mathcal{L}h(\mathbf{x}) + \mathcal{M}h^*(\mathbf{x}) = \frac{1}{I}\xi(\mathbf{x}), \quad (3.21)$$

を満たす関数 $h(\mathbf{x})$ を用いて, 新しい関数 $\mathbf{y}_{-1}(\mathbf{x})$ を次式で導入する [46] :

$$\mathbf{y}_{-1}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} h(\mathbf{x}) \\ h^*(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \quad (3.22)$$

ただし I は実数であり, その値は後で決定する. $\mathbf{y}_{-1}(\mathbf{x})$ は BdG 方程式の固有関数ではなく, ゼロモード $\mathbf{y}_0(\mathbf{x})$ と

$$T\mathbf{y}_{-1}(\mathbf{x}) = \frac{1}{I}\mathbf{y}_0(\mathbf{x}), \quad (3.23)$$

という関係にある. $\mathbf{y}_{-1}(\mathbf{x})$ と BdG 方程式の固有関数との直交性を調べてみる. まず

$$\begin{aligned} E_n(\mathbf{y}_{-1}, \mathbf{y}_n) &= (\mathbf{y}_{-1}, T\mathbf{y}_n) \\ &= (T\mathbf{y}_{-1}, \mathbf{y}_n) \\ &= \frac{1}{I}(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}_n) \\ &= 0, \end{aligned} \quad (3.24)$$

より $(\mathbf{y}_{-1}, \mathbf{y}_n) = 0$ となる. 同様にして $(\mathbf{y}_{-1}, \mathbf{z}_n) = 0$ が分かる. また

$$\begin{aligned} \|\mathbf{y}_{-1}\|^2 &= \int d^3x (|h(\mathbf{x})|^2 - |h(\mathbf{x})|^2) \\ &= 0, \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{y}_{-1}, \mathbf{y}_0) &= \int d^3x (h^*(\mathbf{x})\xi(\mathbf{x}) + h(\mathbf{x})\xi^*(\mathbf{x})) \\ &= 1, \end{aligned} \quad (3.26)$$

である. ただし式 (3.26) の最後の等号が成り立つように, I を定義する. このように $\mathbf{y}_{-1}(\mathbf{x})$ はゼロノルムであり, $\mathbf{y}_0(\mathbf{x})$ 以外の固有関数とは直交する. また,

$$\sigma_1 \mathbf{y}_0^*(\mathbf{x}) = -\mathbf{y}_0(\mathbf{x}), \quad (3.27)$$

$$\sigma_1 \mathbf{y}_{-1}^*(\mathbf{x}) = \mathbf{y}_{-1}(\mathbf{x}), \quad (3.28)$$

という対称性が成立している.

以上を踏まえて, $\{\mathbf{y}_n, \mathbf{z}_n, \mathbf{y}_0, \mathbf{y}_{-1}\}$ で張られる完全性を次式で仮定する :

$$\sum_n \left\{ \mathbf{y}_n(\mathbf{x})\mathbf{y}_n^\dagger(\mathbf{x}') - \mathbf{z}_n(\mathbf{x})\mathbf{z}_n^\dagger(\mathbf{x}') \right\} + \mathbf{y}_0(\mathbf{x})\mathbf{y}_0^\dagger(\mathbf{x}') + \mathbf{y}_{-1}(\mathbf{x})\mathbf{y}_{-1}^\dagger(\mathbf{x}') = \sigma_3 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (3.29)$$

この完全系を用いて, 任意の 2 重項 $s(x)$ を

$$s(x) = \sum_n \left\{ A_n y_n(x) - B_n z_n(x) \right\} + C y_0(x) + D y_{-1}(x), \quad (3.30)$$

と展開できる. ただし,

$$A_n = (y_n, s), \quad B_n = (z_n, s), \quad (3.31)$$

$$C = (y_{-1}, s), \quad D = (y_0, s), \quad (3.32)$$

である.

3.2 複素固有値が存在する場合の固有関数の性質

次に BdG 方程式に複素固有値が存在する場合の議論に移る.

まず複素固有値 E_μ に属する固有関数 $y_\mu(x)$ について

$$\begin{aligned} E_\mu \|y_\mu\|^2 &= (y_\mu, T y_\mu) \\ &= (T y_\mu, y_\mu) \\ &= E_\mu^* \|y_\mu\|^2, \end{aligned} \quad (3.33)$$

であり, 条件より $\text{Im} E_\mu \neq 0$ であるから

$$\|y_\mu\|^2 = 0, \quad (3.34)$$

となる. つまり複素モードは必ずゼロノルムであることが分かる.

さらに

$$\begin{aligned} E_\mu (y_\nu, y_\mu) &= (y_\nu, T y_\mu) \\ &= (T y_\nu, y_\mu) \\ &= E_\nu^* (y_\nu, y_\mu), \end{aligned} \quad (3.35)$$

であるので, $E_\mu \neq E_\nu^*$ であれば他の複素モードと直交する. $y_\mu(x)$ は全ての実モード, ゼロモードと直交することも容易に示される. つまり $y_\mu(x)$ と直交しない固有関数は, 固有値 E_μ^* に属する固有関数のみである. もし固有値 E_μ^* に属する固有関数が存在しなければ, $y_\mu(x)$ は全ての固有関数と直交することになり, 完全性が壊されてしまう. しかし BdG 方程式の持つ対称性 (3.6) より, E_μ が BdG 方程式の固有値であれば E_μ^* もまた固有値であることが保証される. この証明は本質的には次式で行われる:

$$\text{Det} |T - E_\mu|^* = \text{Det} |T^\dagger - E_\mu^*| = \text{Det} |\sigma_3 T \sigma_3 - E_\mu^*| = \text{Det} |T - E_\mu^*|. \quad (3.36)$$

これより E_μ が固有値ならば, E_μ^* も固有値であることが分かる.

以後、 E_μ^* に属する固有関数を $\mathbf{y}_{*\mu}(\mathbf{x})$ と書くことにしよう。これを一般性を損ねずに以下の様に規格化する。

$$(\mathbf{y}_\mu, \mathbf{y}_{*\nu}) = \delta_{\mu\nu}. \quad (3.37)$$

また実固有値の場合と同様にして、固有関数 $\mathbf{y}_\mu(\mathbf{x})$ に対して

$$\mathbf{z}_\mu = \sigma_1 \mathbf{y}_\mu^*, \quad (3.38)$$

は固有値 $-E_\mu^*$ に属する固有関数であることが分かる。 $\mathbf{z}_\mu(\mathbf{x})$ は全ての実モード、ゼロモードと直交し

$$\|\mathbf{z}_\mu\|^2 = 0, \quad (\mathbf{z}_\mu, \mathbf{y}_\nu) = 0, \quad (3.39)$$

$$(\mathbf{z}_\mu, \mathbf{y}_{*\nu}) = 0, \quad (\mathbf{z}_\mu, \mathbf{z}_{*\nu}) = -\delta_{\mu\nu}, \quad (3.40)$$

を満たす。

以上を踏まえて、複素固有値が存在する場合の完全性を次式で仮定する：

$$\begin{aligned} & \sum_n \left\{ \mathbf{y}_n(\mathbf{x}) \mathbf{y}_n^\dagger(\mathbf{x}') - \mathbf{z}_n(\mathbf{x}) \mathbf{z}_n^\dagger(\mathbf{x}') \right\} + \mathbf{y}_0(\mathbf{x}) \mathbf{y}_{-1}^\dagger(\mathbf{x}') + \mathbf{y}_{-1}(\mathbf{x}) \mathbf{y}_0^\dagger(\mathbf{x}') \\ & + \sum_\mu \left\{ \mathbf{y}_\mu(\mathbf{x}) \mathbf{y}_{*\mu}^\dagger(\mathbf{x}') + \mathbf{y}_{*\mu}(\mathbf{x}) \mathbf{y}_\mu^\dagger(\mathbf{x}') - \mathbf{z}_\mu(\mathbf{x}) \mathbf{z}_{*\mu}^\dagger(\mathbf{x}') - \mathbf{z}_{*\mu}(\mathbf{x}) \mathbf{z}_\mu^\dagger(\mathbf{x}') \right\} \\ & = \sigma_3 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \end{aligned} \quad (3.41)$$

この完全系を用いて、任意の 2 重項 $\mathbf{s}(\mathbf{x})$ を

$$\begin{aligned} \mathbf{s}(\mathbf{x}) = & \sum_n \left\{ A_n \mathbf{y}_n(\mathbf{x}) - B_n \mathbf{z}_n(\mathbf{x}) \right\} + C \mathbf{y}_0(\mathbf{x}) + D \mathbf{y}_{-1}(\mathbf{x}) \\ & + \sum_\mu \left\{ A_\mu \mathbf{y}_\mu(\mathbf{x}) + A_{*\mu} \mathbf{y}_{*\mu}(\mathbf{x}) - B_\mu \mathbf{z}_\mu(\mathbf{x}) - B_{*\mu} \mathbf{z}_{*\mu}(\mathbf{x}) \right\}, \end{aligned} \quad (3.42)$$

と展開できる。ただし

$$A_n = (\mathbf{y}_n, \mathbf{s}), \quad B_n = (\mathbf{z}_n, \mathbf{s}), \quad (3.43)$$

$$C = (\mathbf{y}_{-1}, \mathbf{s}), \quad D = (\mathbf{y}_0, \mathbf{s}), \quad (3.44)$$

$$A_\mu = (\mathbf{y}_{*\mu}, \mathbf{s}), \quad A_{*\mu} = (\mathbf{y}_\mu, \mathbf{s}), \quad (3.45)$$

$$B_\mu = (\mathbf{z}_{*\mu}, \mathbf{s}), \quad B_{*\mu} = (\mathbf{z}_\mu, \mathbf{s}), \quad (3.46)$$

である。

3.3 Bogoliubov-de Gennes 方程式に対する摂動計算

以上の準備のもとに、BdG 方程式に対する摂動計算を定式化する。GP 方程式がある微小パラメータ ε で摂動展開することができたとする：

$$\xi(\mathbf{x}) = \xi^{(0)}(\mathbf{x}) + \varepsilon \xi^{(1)}(\mathbf{x}) + O(\varepsilon^2), \quad (3.47)$$

$$\mu = \mu^{(0)} + \varepsilon \mu^{(1)} + O(\varepsilon^2). \quad (3.48)$$

BdG 方程式に現れる T は $\xi(\mathbf{x})$, μ を含むので, 同じく ε の冪で展開される:

$$T = T_0 + \varepsilon T' + O(\varepsilon^2). \quad (3.49)$$

ただし,

$$T_0 = \begin{pmatrix} \mathcal{L}_0 & \mathcal{M}_0 \\ -\mathcal{M}_0^* & -\mathcal{L}_0 \end{pmatrix}, \quad (3.50)$$

$$T' = \begin{pmatrix} \mathcal{L}' & \mathcal{M}' \\ -\mathcal{M}'^* & -\mathcal{L}' \end{pmatrix}, \quad (3.51)$$

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 + \varepsilon \mathcal{L}' + O(\varepsilon^2), \quad (3.52)$$

$$\mathcal{M} = \mathcal{M}_0 + \varepsilon \mathcal{M}' + O(\varepsilon^2), \quad (3.53)$$

である. ここで

$$\sigma_1 T_0 \sigma_1 = -T_0^*, \quad \sigma_1 T' \sigma_1 = -T'^*, \quad (3.54)$$

$$\sigma_3 T_0 \sigma_3 = T_0^\dagger, \quad \sigma_3 T' \sigma_3 = T'^\dagger, \quad (3.55)$$

であり, T が持っていた対称性 (3.5), (3.6) は摂動の次数ごとに保たれている.

T の展開に伴い BdG 方程式に関する諸量も ε で展開される:

$$\mathbf{y}_n(\mathbf{x}) = \mathbf{y}_n^{(0)}(\mathbf{x}) + \varepsilon \mathbf{y}_n^{(1)}(\mathbf{x}) + O(\varepsilon^2), \quad (3.56)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \varepsilon E_n^{(1)} + O(\varepsilon^2). \quad (3.57)$$

同様に $\mathbf{z}_n(\mathbf{x})$, $\mathbf{y}_0(\mathbf{x})$, $\mathbf{y}_{-1}(\mathbf{x})$, $\mathbf{y}_\mu(\mathbf{x})$, $\mathbf{z}_\mu(\mathbf{x})$, E_μ も ε で展開される.

展開を BdG 方程式に代入して ε の冪について整理すると 0 次の BdG 方程式

$$(T_0 - E_n^{(0)})\mathbf{y}_n^{(0)}(\mathbf{x}) = 0, \quad (3.58)$$

及び 1 次の BdG 方程式

$$(T_0 - E_n^{(0)})\mathbf{y}_n^{(1)}(\mathbf{x}) + (T' - E_n^{(1)})\mathbf{y}_n^{(0)}(\mathbf{x}) = 0, \quad (3.59)$$

を得る. ここで 0 次の BdG 方程式は完全に解けているものとし, その固有関数は以下の完全系をなすものとする.

$$\begin{aligned} & \sum_n \left[\mathbf{y}_n^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{y}_n^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') - \mathbf{z}_n^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{z}_n^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') \right] + \frac{1}{I} \left[\mathbf{y}_0^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{y}_{-1}^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') + \mathbf{y}_{-1}^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{y}_0^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') \right] \\ & + \sum_\mu \left[\mathbf{y}_\mu^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{y}_{*\mu}^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') + \mathbf{y}_{*\mu}^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{y}_\mu^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') - \mathbf{z}_\mu^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{z}_{*\mu}^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') - \mathbf{z}_{*\mu}^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{z}_\mu^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') \right] \\ & = \sigma_3 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \end{aligned} \quad (3.60)$$

まずは簡単のために, 0 次の BdG 方程式の全ての固有値が実数の場合を考える. その後, 議論を 0 次の BdG 方程式に複素固有値が存在する場合に拡張する.

3.4 全ての0次の固有値が実数の場合の摂動計算

ここでは0次の BdG 方程式に複素固有値が存在しないものとする。従って完全性の条件 (3.60) は

$$\begin{aligned} \sum_n \left[\mathbf{y}_n^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{y}_n^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') - \mathbf{z}_n^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{z}_n^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') \right] + \mathbf{y}_0^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{y}_{-1}^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') + \mathbf{y}_{-1}^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{y}_0^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') \\ = \sigma_3 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \end{aligned} \quad (3.61)$$

となる。この完全系を用いて、1 次の固有関数 $\mathbf{y}_n^{(1)}(\mathbf{x})$ を以下のように展開する。

$$\mathbf{y}_n^{(1)}(\mathbf{x}) = \sum_m \left[A_m \mathbf{y}_m^{(0)}(\mathbf{x}) - B_m \mathbf{z}_m^{(0)}(\mathbf{x}) \right] + C \mathbf{y}_0^{(0)}(\mathbf{x}) + D \mathbf{y}_{-1}^{(0)}(\mathbf{x}). \quad (3.62)$$

ただし

$$A_m = \left(\mathbf{y}_m^{(0)}, \mathbf{y}_n^{(1)} \right), \quad B_m = \left(\mathbf{z}_m^{(0)}, \mathbf{y}_n^{(1)} \right), \quad (3.63)$$

$$C = \left(\mathbf{y}_{-1}^{(0)}, \mathbf{y}_n^{(1)} \right), \quad D = \left(\mathbf{y}_0^{(0)}, \mathbf{y}_n^{(1)} \right), \quad (3.64)$$

である。

3.4.1 注目する準位に縮退が存在しない場合

まずは注目する準位 $E_n^{(0)}$ に縮退が存在しない場合を考える。これらの計算は基本的には良く知られた Schrödinger 方程式に対する摂動計算と同じである。ただし不定計量内積のため議論は自明ではなく、計算を1つ1つ確認していく必要がある。

1 次の BdG 方程式 (3.59) に左から $\mathbf{y}_n^{(0)}(\mathbf{x})$ を内積させると

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{y}_n^{(0)}, \{T_0 - E_n^{(0)}\} \mathbf{y}_n^{(1)} \right) + \left(\mathbf{y}_n^{(0)}, \{T' - E_n^{(1)}\} \mathbf{y}_n^{(0)} \right) = 0 \\ \Rightarrow E_n^{(1)} = \left(\mathbf{y}_n^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right), \end{aligned} \quad (3.65)$$

となり、1 次の固有値 $E_n^{(1)}$ が求められる。

また $m \neq n$ として、 $\mathbf{y}_m^{(0)}(\mathbf{x})$ を左から内積させると

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{y}_m^{(0)}, \{T_0 - E_n^{(0)}\} \mathbf{y}_n^{(1)} \right) + \left(\mathbf{y}_m^{(0)}, \{T' - E_n^{(1)}\} \mathbf{y}_n^{(0)} \right) = 0 \\ \Rightarrow A_m = \frac{\left(\mathbf{y}_m^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right)}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \end{aligned} \quad (3.66)$$

と A_m ($m \neq n$) が求められる。同様に $\mathbf{z}_m^{(0)}(\mathbf{x})$, $\mathbf{y}_0^{(0)}(\mathbf{x})$ を左から内積させ

$$B_m = \frac{\left(\mathbf{z}_m^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right)}{E_n^{(0)} + E_m^{(0)}}, \quad D = \frac{\left(\mathbf{y}_0^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right)}{E_n^{(0)}}, \quad (3.67)$$

を得る. なおここで $E_n^{(0)} + E_m^{(0)} = 0$ となることはないことを注意しておく. もし 0 になるのであればそれは $\mathbf{y}_n^{(0)}(\mathbf{x})$ と $\mathbf{z}_m^{(0)}(\mathbf{x})$ が縮退することを意味し, 注目する準位に縮退がないという現在の仮定に反するためである.

最後に, 左から $\mathbf{y}_{-1}^{(0)}(\mathbf{x})$ を内積させることで, C を決める式を得る:

$$\begin{aligned} & \left(\mathbf{y}_{-1}^{(0)}, \{T_0 - E_n^{(0)}\} \mathbf{y}_n^{(1)} \right) + \left(\mathbf{y}_{-1}^{(0)}, \{T' - E_n^{(1)}\} \mathbf{y}_n^{(0)} \right) = 0 \\ \Rightarrow & C = \frac{D}{IE_n^{(0)}} + \frac{\left(\mathbf{y}_{-1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right)}{E_n^{(0)}} \\ \Rightarrow & C = \frac{\left(\mathbf{y}_0^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right)}{IE_n^{(0)2}} + \frac{\left(\mathbf{y}_{-1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right)}{E_n^{(0)}}, \end{aligned} \quad (3.68)$$

ここで

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{y}_{-1}^{(0)}, T_0 \mathbf{y}_n^{(1)} \right) &= \left(T_0 \mathbf{y}_{-1}^{(0)}, \mathbf{y}_n^{(1)} \right) \\ &= \frac{1}{I} \left(\mathbf{y}_0^{(0)}, \mathbf{y}_n^{(1)} \right) \\ &= \frac{D}{I}, \end{aligned} \quad (3.69)$$

であることを用いた.

ここまでで A_n 以外の全ての係数が決定された. 次に通常の摂動論と同様 $A_n = 0$ と置くことができることを確認する. BdG 方程式の線形性より $\mathbf{y}_n(\mathbf{x})$ の定数倍

$$(1 - \varepsilon A_n) \mathbf{y}_n(\mathbf{x}) = \mathbf{y}_n(\mathbf{x}) + \varepsilon \left(\mathbf{y}_n^{(1)} - A_n \mathbf{y}_n^{(0)} \right) + O(\varepsilon^2), \quad (3.70)$$

も $\mathbf{y}_n(\mathbf{x})$ と同じ固有関数である. これは (3.62) で $A_n = 0$ と置いたものに他ならない. このように A_n の不定性は BdG 方程式の線形性に起因する. 従って $\mathbf{y}_n(\mathbf{x})$ が規格化条件を満足するように A_n を選んでしまえばよい.

$$\begin{aligned} \|\mathbf{y}_n\|^2 &= \|\mathbf{y}_n^{(0)} + \varepsilon \mathbf{y}_n^{(1)}\|^2 + O(\varepsilon^2) \\ &= 1 + 2\varepsilon \text{Re} A_n + O(\varepsilon^2), \end{aligned} \quad (3.71)$$

であるから, $A_n = 0$ とすれば ε^1 のオーダーで規格化される. 以上で摂動計算により 1 次の固有値, 固有関数を求めることができた:

$$E_n^{(1)} = \left(\mathbf{y}_n^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right), \quad (3.72)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_n^{(1)}(\mathbf{x}) &= \sum_{m \neq n} \frac{\left(\mathbf{y}_m^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right)}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \mathbf{y}_m^{(0)}(\mathbf{x}) - \sum_m \frac{\left(\mathbf{z}_m^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right)}{E_n^{(0)} + E_m^{(0)}} \mathbf{z}_m^{(0)}(\mathbf{x}) \\ &\quad + \left\{ \frac{\left(\mathbf{y}_0^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right)}{IE_n^{(0)2}} + \frac{\left(\mathbf{y}_{-1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right)}{E_n^{(0)}} \right\} \mathbf{y}_0^{(0)}(\mathbf{x}) + \frac{\left(\mathbf{y}_0^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right)}{E_n^{(0)}} \mathbf{y}_{-1}^{(0)}(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (3.73)$$

ここで T' の擬エルミート性と内積の共役対称性により

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{y}_n^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right) &= \left(T' \mathbf{y}_n^{(0)}, \mathbf{y}_n^{(0)} \right)^* \\ &= \left(\mathbf{y}_n^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right)^*, \end{aligned} \quad (3.74)$$

が成立するので, $E_n^{(1)}$ は実数になる.

同様に $\mathbf{z}_n^{(1)}(\mathbf{x})$ を求める. まず $\mathbf{z}_n(\mathbf{x})$ に対する BdG 方程式は

$$(T_0 + E_n^{(0)}) \mathbf{z}_n^{(0)}(\mathbf{x}) = 0, \quad (3.75)$$

$$(T_0 + E_n^{(0)}) \mathbf{z}_n^{(1)}(\mathbf{x}) + (T_1 + E_n^{(1)}) \mathbf{z}_n^{(0)}(\mathbf{x}) = 0, \quad (3.76)$$

であり, 同様の計算により

$$\begin{aligned} \mathbf{z}_n^{(1)}(\mathbf{x}) &= - \sum_m \frac{\left(\mathbf{y}_m^{(0)}, T' \mathbf{z}_n^{(0)} \right)}{E_n^{(0)} + E_m^{(0)}} \mathbf{y}_m^{(0)}(\mathbf{x}) + \sum_{m \neq n} \frac{\left(\mathbf{z}_m^{(0)}, T' \mathbf{z}_n^{(0)} \right)}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \mathbf{z}_m^{(0)}(\mathbf{x}) \\ &\quad + \left\{ \frac{\left(\mathbf{y}_0^{(0)}, T' \mathbf{z}_n^{(0)} \right)}{I E_n^{(0)2}} + \frac{\left(\mathbf{y}_{-1}^{(0)}, T' \mathbf{z}_n^{(0)} \right)}{E_n^{(0)}} \right\} \mathbf{y}_0^{(0)}(\mathbf{x}) - \frac{\left(\mathbf{y}_0^{(0)}, T' \mathbf{z}_n^{(0)} \right)}{E_n^{(0)}} \mathbf{y}_{-1}^{(0)}(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (3.77)$$

を得る. ここで

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{y}_m^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right)^* &= \left(\sigma_1 \mathbf{z}_m^{(0)}, T'^* \sigma_1 \mathbf{z}_n^{(0)} \right) \\ &= \left(\mathbf{z}_m^{(0)}, T' \mathbf{z}_n^{(0)} \right), \end{aligned} \quad (3.78)$$

などに注意して計算すると

$$\mathbf{z}_n^{(1)}(\mathbf{x}) = \sigma_1 \mathbf{y}_n^{(1)*}(\mathbf{x}), \quad (3.79)$$

が示される. ここで示されたように, 摂動によって $\mathbf{y}(\mathbf{x})$ と $\mathbf{z}(\mathbf{x})$ の間の対称性は崩れない. これは T の対称性 (3.5), (3.6) が摂動のそれぞれの次数で守られていたためである.

なおゼロモードに関する摂動計算を行う必要はない. ゼロモードに関する 1 次の固有関数, 固有値は自明である:

$$\mathbf{y}_0^{(1)}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \xi^{(1)}(\mathbf{x}) \\ -\xi^{(1)*}(\mathbf{x}) \end{pmatrix}, \quad (3.80)$$

$$E_0^{(1)}(\mathbf{x}) = 0. \quad (3.81)$$

3.4.2 注目する準位に $\mathbf{y}^{(0)}$ 同士の縮退が存在する場合

注目する準位 $E_n^{(0)}$ には r 個の固有関数 $\mathbf{y}_{n_1}^{(0)}(\mathbf{x}), \mathbf{y}_{n_2}^{(0)}(\mathbf{x}), \dots, \mathbf{y}_{n_r}^{(0)}(\mathbf{x})$ が縮退しているとする. 縮退がある場合の摂動法の一般論に則り, 0 次の固有関数を

$$\mathbf{y}_n^{(0)}(\mathbf{x}) = \sum_j^r \alpha_j \mathbf{y}_{n_j}^{(0)}(\mathbf{x}), \quad (3.82)$$

と書く. これを 1 次の BdG 方程式 (3.59) に代入し, 左から $\mathbf{y}_{n_i}^{(0)}(\mathbf{x})$ を内積させると

$$\sum_j^r \left[\left(\mathbf{y}_{n_i}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_j}^{(0)} \right) - E_n^{(1)} \delta_{ij} \right] \alpha_j = 0, \quad (3.83)$$

が得られる. つまり

$$\begin{pmatrix} \left(\mathbf{y}_{n_1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_1}^{(0)} \right) - E_n^{(1)} & \left(\mathbf{y}_{n_1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_2}^{(0)} \right) & \cdots & \left(\mathbf{y}_{n_1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_r}^{(0)} \right) \\ \left(\mathbf{y}_{n_2}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_1}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{y}_{n_2}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_2}^{(0)} \right) - E_n^{(1)} & \cdots & \left(\mathbf{y}_{n_2}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_r}^{(0)} \right) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(\mathbf{y}_{n_r}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_1}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{y}_{n_r}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_2}^{(0)} \right) & \cdots & \left(\mathbf{y}_{n_r}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_r}^{(0)} \right) - E_n^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.84)$$

である. $\{\alpha_i\}$ が非自明となるために,

$$\begin{vmatrix} \left(\mathbf{y}_{n_1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_1}^{(0)} \right) - E_n^{(1)} & \left(\mathbf{y}_{n_1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_2}^{(0)} \right) & \cdots & \left(\mathbf{y}_{n_1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_r}^{(0)} \right) \\ \left(\mathbf{y}_{n_2}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_1}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{y}_{n_2}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_2}^{(0)} \right) - E_n^{(1)} & \cdots & \left(\mathbf{y}_{n_2}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_r}^{(0)} \right) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(\mathbf{y}_{n_r}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_1}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{y}_{n_r}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_2}^{(0)} \right) & \cdots & \left(\mathbf{y}_{n_r}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_r}^{(0)} \right) - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \quad (3.85)$$

でなくてはならない. これが 1 次の固有値 $E_n^{(1)}$ を決定する永年方程式である. $E_n^{(1)}$ は行列

$$\begin{pmatrix} \left(\mathbf{y}_{n_1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_1}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{y}_{n_1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_2}^{(0)} \right) & \cdots & \left(\mathbf{y}_{n_1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_r}^{(0)} \right) \\ \left(\mathbf{y}_{n_2}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_1}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{y}_{n_2}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_2}^{(0)} \right) & \cdots & \left(\mathbf{y}_{n_2}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_r}^{(0)} \right) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(\mathbf{y}_{n_r}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_1}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{y}_{n_r}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_2}^{(0)} \right) & \cdots & \left(\mathbf{y}_{n_r}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_r}^{(0)} \right) \end{pmatrix}, \quad (3.86)$$

の固有値である. T' の擬エルミート性と内積の共役対称性により

$$\left(\mathbf{y}_{n_1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_2}^{(0)} \right) = \left(\mathbf{y}_{n_2}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_1}^{(0)} \right)^*, \quad (3.87)$$

となるため, この行列はエルミート行列であることが分かる. 従って $E_n^{(1)}$ は必ず実数になる.

また縮退がない場合と同様に, $\mathbf{z}_n^{(1)}(\mathbf{x}) = \sigma_1 \mathbf{y}_n^{(1)*}(\mathbf{x})$ が成立する. 従って $\mathbf{z}^{(0)}(\mathbf{x})$ 同士が縮退する場合にも, 複素固有値は現れない.

3.4.3 注目する準位に $\mathbf{y}^{(0)}$ と $\mathbf{z}^{(0)}$ との縮退が存在する場合

注目する準位 $E_n^{(0)}$ には r 個の正ノルムの固有関数 $\mathbf{y}_{n_1}^{(0)}(\mathbf{x}), \mathbf{y}_{n_2}^{(0)}(\mathbf{x}), \dots, \mathbf{y}_{n_r}^{(0)}(\mathbf{x})$, s 個の負ノルムの固有関数 $\mathbf{z}_{n'_1}^{(0)}(\mathbf{x}), \mathbf{z}_{n'_2}^{(0)}(\mathbf{x}), \dots, \mathbf{z}_{n'_s}^{(0)}(\mathbf{x})$, が縮退しているとする.

0 次の固有関数 $\mathbf{u}_n^{(0)}(\mathbf{x})$ を

$$\mathbf{u}_n^{(0)}(\mathbf{x}) = \sum_j^r \alpha_j \mathbf{y}_{n_j}^{(0)}(\mathbf{x}) + \sum_j^s \beta_j \mathbf{z}_{n'_j}^{(0)}(\mathbf{x}), \quad (3.88)$$

と書く. 1 次の BdG 方程式 (3.59) に代入し, 左から $\mathbf{y}_{n_i}^{(0)}(\mathbf{x})$, $\mathbf{z}_{n'_i}^{(0)}(\mathbf{x})$ を内積させると

$$\sum_j^r \left[\left(\mathbf{y}_{n_i}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_j} \right) - E_n^{(1)} \delta_{ij} \right] \alpha_j + \sum_j^s \left(\mathbf{y}_{n_i}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{n'_j} \right) \beta_j = 0, \quad (3.89)$$

$$\sum_j^r \left(\mathbf{z}_{n'_i}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_j} \right) \alpha_j + \sum_j^s \left[\left(\mathbf{z}_{n'_i}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{n'_j} \right) + E_n^{(1)} \delta_{ij} \right] \beta_j = 0, \quad (3.90)$$

となる. 従って $\{\alpha_i\}$, $\{\beta_j\}$ が非自明となるためには, 永年方程式

$$\begin{vmatrix} \left(\mathbf{y}_{n_1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_1}^{(0)} \right) - E_n^{(1)} & \cdots & \left(\mathbf{y}_{n_1}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{n'_1}^{(0)} \right) & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \\ \left(\mathbf{z}_{n'_1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_1}^{(0)} \right) & \cdots & \left(\mathbf{z}_{n'_1}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{n'_1}^{(0)} \right) + E_n^{(1)} & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} = 0, \quad (3.91)$$

が成立していなくてはならない. 小行列

$$[L_y]_{r \times r, ij} = \left(\mathbf{y}_{n_i}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n_j}^{(0)} \right), \quad (3.92)$$

$$[L_z]_{s \times s, ij} = \left(\mathbf{z}_{n'_i}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{n'_j}^{(0)} \right), \quad (3.93)$$

$$[M]_{r \times s, ij} = \left(\mathbf{y}_{n_i}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{n'_j}^{(0)} \right), \quad (3.94)$$

を導入して, この永年方程式を以下のように書く:

$$\left| \begin{pmatrix} L_y & M \\ M^\dagger & L_z \end{pmatrix} - E_n^{(1)} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \right| = 0. \quad (3.95)$$

ただし I は適当な大きさの単位行列である. 上式を変形して,

$$\left| \begin{pmatrix} L_y & M \\ -M^\dagger & -L_z \end{pmatrix} - E_n^{(1)} \right| = 0, \quad (3.96)$$

を得る. 従って $E_n^{(1)}$ は行列

$$T = \begin{pmatrix} L_y & M \\ -M^\dagger & -L_z \end{pmatrix}, \quad (3.97)$$

の固有値として与えられる. この行列は一般にエルミート行列でない. 従って $E_n^{(1)}$ は実とは限らない.

さて, T が持つ対称性

$$S_3 T S_3 = T^\dagger, \quad (3.98)$$

に注目する. ただし

$$S_3 = \begin{pmatrix} I & O \\ O & -I \end{pmatrix}, \quad (3.99)$$

である. T が固有値 $E_n^{(1)}$ を持つならば, T に相似な $T^\dagger$ も同じ固有値 $E_n^{(1)}$ を持つ. さらに $T^\dagger$ のエルミート共役である T は, 複素共役 $E_n^{(1)*}$ を固有値に持つ. 従って $E_n^{(1)}$ が複素固有値の場合, 必ず複素共役 $E_n^{(1)*}$ を伴って出現する.

3.5 複素固有値出現条件

以上までで得られた結果を整理する. 前節では摂動 0 次のオーダーでは複素固有値が存在せず, 全ての固有値が実である場合を考えた. 0 次に縮退が存在しない場合, もしくは存在したとしてもその縮退が正ノルムの固有関数 $\mathbf{y}^{(0)}(\mathbf{x})$ のみによる縮退や負ノルムの固有関数 $\mathbf{z}^{(0)}(\mathbf{x})$ のみによる縮退の場合, 1 次の固有値は必ず実数になるということを示した. 1 次の固有値が複素数になるためには, $\mathbf{y}^{(0)}(\mathbf{x})$ と $\mathbf{z}^{(0)}(\mathbf{x})$ との縮退が必要である. この特別な縮退が複素固有値に必要であるということは, 特定なモデルの BdG 方程式を数値的に解いた先行研究 [23, 24, 25] においても示唆されている. 本章では複素固有値出現のための正ノルムと負ノルムの固有関数の間の縮退の必要性を, モデルに依らず一般的に示した.

この特別な縮退はあくまで複素固有値出現のための必要条件であって, 十分条件ではない. 例えば, ある正ノルムの固有関数 $\mathbf{y}_1^{(0)}(\mathbf{x})$ と負ノルムの固有関数 $\mathbf{z}_2^{(0)}(\mathbf{x})$ との 2 重縮退を考える. このとき 1 次の固有値 $E^{(1)}$ を決定する永年方程式は

$$\begin{vmatrix} \left(\mathbf{y}_1^{(0)}, T' \mathbf{y}_1^{(0)} \right) - E^{(1)} & \left(\mathbf{y}_1^{(0)}, T' \mathbf{z}_2^{(0)} \right) \\ \left(\mathbf{z}_2^{(0)}, T' \mathbf{y}_1^{(0)} \right) & \left(\mathbf{z}_2^{(0)}, T' \mathbf{z}_2^{(0)} \right) + E^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \quad (3.100)$$

となる. これを書き直せば,

$$\begin{aligned} E^{(1)2} - \left\{ \left(\mathbf{y}_1^{(0)}, T' \mathbf{y}_1^{(0)} \right) - \left(\mathbf{z}_2^{(0)}, T' \mathbf{z}_2^{(0)} \right) \right\} E^{(1)} \\ + \left| \left(\mathbf{y}_1^{(0)}, T' \mathbf{z}_2^{(0)} \right) \right|^2 - \left(\mathbf{y}_1^{(0)}, T' \mathbf{y}_1^{(0)} \right) \left(\mathbf{z}_2^{(0)}, T' \mathbf{z}_2^{(0)} \right) = 0, \end{aligned} \quad (3.101)$$

が得られる. 従って $E^{(1)}$ が複素数になるのは不等式

$$\left| \left(\mathbf{y}_1^{(0)}, T' \mathbf{y}_1^{(0)} \right) + \left(\mathbf{z}_2^{(0)}, T' \mathbf{z}_2^{(0)} \right) \right| < 2 \left| \left(\mathbf{y}_1^{(0)}, T' \mathbf{z}_2^{(0)} \right) \right|, \quad (3.102)$$

が満たされるときである.

実際に複素固有値出現条件を得るためには次の 3 つの手順を踏めばよい:

1. 0 次の BdG 方程式を解き, 正ノルムの固有関数と負ノルムの固有関数との縮退を探す.
2. その縮退している固有関数による T' の行列要素を計算し, 永年方程式を立てる.
3. 永年方程式を具体的に解き, 固有値 $E^{(1)}$ を求める.

具体的なモデルによる複素固有値出現条件の導出は 4 章及び 5 章で行う.

3.6 0 次に複素固有値が存在する場合の摂動論

続いて 0 次に複素固有値が存在する場合の摂動論を議論する. 0 次の固有関数に関して完全性条件 (3.60) が成立しているものとする:

$$\begin{aligned} \sum_n \left[\mathbf{y}_n^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{y}_n^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') - \mathbf{z}_n^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{z}_n^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') \right] + \frac{1}{I} \left[\mathbf{y}_0^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{y}_{-1}^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') + \mathbf{y}_{-1}^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{y}_0^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') \right] \\ + \sum_{\mu} \left[\mathbf{y}_{\mu}^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{y}_{*\mu}^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') + \mathbf{y}_{*\mu}^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{y}_{\mu}^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') - \mathbf{z}_{\mu}^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{z}_{*\mu}^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') - \mathbf{z}_{*\mu}^{(0)}(\mathbf{x}) \mathbf{z}_{\mu}^{(0)\dagger}(\mathbf{x}') \right] \\ = \sigma_3 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \end{aligned} \quad (3.103)$$

3.6.1 注目する準位が実モードの場合

実固有値 $E_n^{(0)}$ に属する固有関数の 1 つ $\mathbf{y}_n^{(0)}(\mathbf{x})$ に注目する。ここで縮退はあってもなくてもかまわない。またここでは正ノルムの固有関数 $\mathbf{y}_n^{(0)}(\mathbf{x})$ についての議論を行うが、 $\mathbf{y}(\mathbf{x})$ と $\mathbf{z}(\mathbf{x})$ 間の対称性により、直ちに $\mathbf{z}_n^{(0)}(\mathbf{x})$ についても分かる。

1 次の固有関数 $\mathbf{y}_n^{(1)}(\mathbf{x})$ は以下のように展開される：

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_n^{(1)}(\mathbf{x}) = & \sum_m \left[A_m \mathbf{y}_m^{(0)}(\mathbf{x}) - B_m \mathbf{z}_m^{(0)}(\mathbf{x}) \right] + \left[C \mathbf{y}_0^{(0)}(\mathbf{x}) + D \mathbf{y}_{-1}^{(0)}(\mathbf{x}) \right] \\ & + \sum_\mu \left[A_\mu \mathbf{y}_\mu^{(0)}(\mathbf{x}) + A_{*\mu} \mathbf{y}_{*\mu}^{(0)}(\mathbf{x}) - B_\mu \mathbf{z}_\mu^{(0)}(\mathbf{x}) - B_{*\mu} \mathbf{z}_{*\mu}^{(0)}(\mathbf{x}) \right]. \end{aligned} \quad (3.104)$$

ただし

$$A_\mu = \left(\mathbf{y}_{*\mu}^{(0)}, \mathbf{y}_n^{(1)} \right), \quad A_{*\mu} = \left(\mathbf{y}_\mu^{(0)}, \mathbf{y}_n^{(1)} \right), \quad (3.105)$$

$$B_\mu = \left(\mathbf{z}_{*\mu}^{(0)}, \mathbf{y}_n^{(1)} \right), \quad B_{*\mu} = \left(\mathbf{z}_\mu^{(0)}, \mathbf{y}_n^{(1)} \right), \quad (3.106)$$

であり、 A_m, B_m, C, D は式 (3.63), (3.64) で定義したものと同一である。

展開 (3.104) を 1 次の BdG 方程式に代入し、左から $\mathbf{y}_\mu^{(0)}(\mathbf{x})$ を内積させ

$$\begin{aligned} & \left(\mathbf{y}_\mu^{(0)}, \{T_0 - E_n^{(0)}\} \mathbf{y}_n^{(1)} \right) + \left(\mathbf{y}_\mu^{(0)}, \{T' - E_n^{(1)}\} \mathbf{y}_n^{(0)} \right) = 0 \\ \Rightarrow & \quad A_{*\mu} = \frac{\left(\mathbf{y}_\mu^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right)}{E_n^{(0)} - E_\mu^{(0)*}}, \end{aligned} \quad (3.107)$$

を得る。同様にして

$$A_\mu = \frac{\left(\mathbf{y}_{*\mu}^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right)}{E_n^{(0)} - E_\mu^{(0)}}, \quad B_{*\mu} = \frac{\left(\mathbf{z}_\mu^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right)}{E_n^{(0)} + E_\mu^{(0)}}, \quad (3.108)$$

$$B_\mu = \frac{\left(\mathbf{z}_{*\mu}^{(0)}, T' \mathbf{y}_n^{(0)} \right)}{E_n^{(0)} + E_\mu^{(0)*}}, \quad (3.109)$$

を得る。縮退がある場合でも、これらの形は変わらない。また固有値 $E_n^{(1)}$ に関する結論も影響を受けない。

3.6.2 注目する準位が縮退しない複素モードの場合

縮退していない複素固有値 $E_\mu^{(0)}$ に属する固有関数 $\mathbf{y}_\mu^{(0)}(\mathbf{x})$ について考え、その 1 次を

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_\mu^{(1)}(\mathbf{x}) = & \sum_m \left[A_m \mathbf{y}_m^{(0)}(\mathbf{x}) - B_m \mathbf{z}_m^{(0)}(\mathbf{x}) \right] + C \mathbf{y}_0^{(0)}(\mathbf{x}) + D \mathbf{y}_{-1}^{(0)}(\mathbf{x}) \\ & + \sum_\nu \left[A_\nu \mathbf{y}_\nu^{(0)}(\mathbf{x}) + A_{*\nu} \mathbf{y}_{*\nu}^{(0)}(\mathbf{x}) - B_\nu \mathbf{z}_\nu^{(0)}(\mathbf{x}) - B_{*\nu} \mathbf{z}_{*\nu}^{(0)}(\mathbf{x}) \right], \end{aligned} \quad (3.110)$$

と展開する. これらの係数は 1 次の BdG 方程式

$$(T_0 - E_\mu^{(0)})\mathbf{y}_\mu^{(1)}(\mathbf{x}) + (T' - E_\mu^{(1)})\mathbf{y}_\mu^{(0)}(\mathbf{x}) = 0, \quad (3.111)$$

を使えば求めることができる:

$$A_m = \frac{(\mathbf{y}_m^{(0)}, T'\mathbf{y}_\mu^{(0)})}{E_\mu^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad B_m = \frac{(z_m^{(0)}, T'\mathbf{y}_\mu^{(0)})}{E_\mu^{(0)} + E_m^{(0)}}, \quad (3.112)$$

$$C = \frac{(\mathbf{y}_0^{(0)}, T'\mathbf{y}_\mu^{(0)})}{IE_\mu^{(0)2}} + \frac{(\mathbf{y}_{-1}^{(0)}, T'\mathbf{y}_\mu^{(0)})}{E_\mu^{(0)}}, \quad D = \frac{(\mathbf{y}_0^{(0)}, T'\mathbf{y}_\mu^{(0)})}{E_\mu^{(0)}}, \quad (3.113)$$

$$A_{*\nu} = \frac{(\mathbf{y}_\nu^{(0)}, T'\mathbf{y}_\mu^{(0)})}{E_\mu^{(0)} - E_\nu^{(0)*}}, \quad A_\nu = \frac{(\mathbf{y}_{*\nu}^{(0)}, T'\mathbf{y}_\mu^{(0)})}{E_\mu^{(0)} - E_\nu^{(0)}} \quad (\nu \neq \mu), \quad (3.114)$$

$$B_{*\nu} = \frac{(z_\nu^{(0)}, T'\mathbf{y}_\mu^{(0)})}{E_\mu^{(0)} + E_\nu^{(0)*}}, \quad B_\nu = \frac{(z_{*\nu}^{(0)}, T'\mathbf{y}_\mu^{(0)})}{E_\mu^{(0)} + E_\nu^{(0)*}}. \quad (3.115)$$

ただし A_μ だけは決定されない. 実モードの場合同様, この係数の不定性は BdG 方程式の線形性に起因する. しかし複素モードの“規格化条件”は $(\mathbf{y}_\mu, \mathbf{y}_{*\mu}) = 1$ であるので, $\mathbf{y}_{*\mu}^{(1)}(\mathbf{x})$ についても考えなくてはならない. $\mathbf{y}_{*\mu}^{(1)}(\mathbf{x})$ の 1 次の BdG 方程式は

$$(T_0 - E_\mu^{(0)*})\mathbf{y}_\mu^{(1)}(\mathbf{x}) + (T' - E_{*\mu}^{(1)})\mathbf{y}_\mu^{(0)}(\mathbf{x}) = 0, \quad (3.116)$$

である. ただし $\mathbf{y}_{*\mu}(\mathbf{x})$ の 1 次の固有値は $E_\mu^{(1)*}$ となるべきであるが, 自明ではないので $E_{*\mu}^{(1)}$ とした. $E_{*\mu}^{(1)} = E_\mu^{(1)*}$ が成立していることは後に確認する. $\mathbf{y}_{*\mu}^{(1)}(\mathbf{x})$ を

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{*\mu}^{(1)}(\mathbf{x}) = & \sum_m \left[a_m \mathbf{y}_m^{(0)}(\mathbf{x}) - b_m z_m^{(0)}(\mathbf{x}) \right] + \left[c \mathbf{y}_0^{(0)}(\mathbf{x}) + d \mathbf{y}_{-1}^{(0)}(\mathbf{x}) \right] \\ & + \sum_\nu \left[a_\nu \mathbf{y}_\nu^{(0)}(\mathbf{x}) + a_{*\nu} \mathbf{y}_{*\nu}^{(0)}(\mathbf{x}) - b_\nu z_\nu^{(0)}(\mathbf{x}) - b_{*\nu} z_{*\nu}^{(0)}(\mathbf{x}) \right], \end{aligned} \quad (3.117)$$

と展開する. これらの係数は $a_{*\mu}$ を除いて決定することができる. ここで“規格化条件”は

$$\begin{aligned} (\mathbf{y}_\mu, \mathbf{y}_{*\mu}) &= (\mathbf{y}_\mu^{(0)} + \varepsilon \mathbf{y}_\mu^{(1)}, \mathbf{y}_{*\mu}^{(0)} + \varepsilon \mathbf{y}_{*\mu}^{(1)}) + O(\varepsilon^2) \\ &= 1 + \varepsilon (\mathbf{y}_\mu^{(0)}, \mathbf{y}_{*\mu}^{(1)}) + \varepsilon (\mathbf{y}_\mu^{(1)}, \mathbf{y}_{*\mu}^{(0)}) + O(\varepsilon^2) \\ &= 1 + \varepsilon (a_{*\mu} + A_\mu^*) + O(\varepsilon^2), \end{aligned} \quad (3.118)$$

となる. 従って $A_\mu = a_{*\mu} = 0$ とすればよい.

$\mathbf{y}_\mu(\mathbf{x})$ が摂動 1 次のオーダーでもゼロノルムであることを確認しておく:

$$A_{*\mu}^* = \frac{(\mathbf{y}_\mu^{(0)}, T'\mathbf{y}_\mu^{(0)})}{E_\mu^{(0)*} - E_\mu^{(0)}} = -A_{*\mu}, \quad (3.119)$$

より $\text{Re}A_{*\mu} = 0$ であり,

$$\begin{aligned}\|\mathbf{y}_\mu\|^2 &= \|\mathbf{y}_\mu^{(0)} + \varepsilon \mathbf{y}_\mu^{(1)}\|^2 + O(\varepsilon^2) \\ &= 2\varepsilon \text{Re}A_{*\mu} + O(\varepsilon^2) \\ &= 0 + O(\varepsilon^2),\end{aligned}\tag{3.120}$$

となっている.

また

$$E_\mu^{(1)} = \left(\mathbf{y}_{*\mu}^{(0)}, T' \mathbf{y}_\mu^{(0)} \right), \quad E_{*\mu}^{(1)} = \left(\mathbf{y}_\mu^{(0)}, T' \mathbf{y}_{*\mu}^{(0)} \right),\tag{3.121}$$

であるから, $E_{*\mu}^{(1)} = E_\mu^{(1)*}$ が確かに満たされている. つまり 0 次で複素固有値が複素共役のペアを伴っていれば, 1 次でもそれは保たれる.

3.6.3 注目する準位が縮退している複素モードの場合

複素モードに関する固有関数は $\mathbf{y}_\mu(\mathbf{x})$, $\mathbf{y}_{*\mu}(\mathbf{x})$, $\mathbf{z}_\mu(\mathbf{x})$, $\mathbf{y}_{*\mu}(\mathbf{x})$ の 4 種類があり, それぞれ固有値 E_μ , E_μ^* , $-E_\mu^*$, $-E_\mu$ に属する. 実モードに関しては正ノルムと負ノルムの固有関数 $\mathbf{y}_n(\mathbf{x})$, $\mathbf{z}_n(\mathbf{x})$ の差異が本質的であったが, 複素モードの場合は 4 種類の固有関数の名付け方に任意性がある. 例えば

$$\tilde{\mathbf{y}}_\mu(\mathbf{x}) = \mathbf{y}_{*\mu}(\mathbf{x}), \quad \tilde{\mathbf{y}}_{*\mu}(\mathbf{x}) = \mathbf{y}_\mu(\mathbf{x}),\tag{3.122}$$

$$\tilde{\mathbf{z}}_\mu(\mathbf{x}) = \mathbf{z}_{*\mu}(\mathbf{x}), \quad \tilde{\mathbf{z}}_{*\mu}(\mathbf{x}) = \mathbf{z}_\mu(\mathbf{x}),\tag{3.123}$$

とすると, チルダ付きの固有関数間の“規格化”は

$$\left(\tilde{\mathbf{y}}_\mu, \tilde{\mathbf{y}}_{*\mu} \right) = 1,\tag{3.124}$$

$$\left(\tilde{\mathbf{z}}_\mu, \tilde{\mathbf{z}}_{*\mu} \right) = -1,\tag{3.125}$$

となっている. $\tilde{\mathbf{y}}_\mu(\mathbf{x})$ が属する固有値は E_μ^* である. また

$$\tilde{\mathbf{y}}_\mu(\mathbf{x}) = \mathbf{z}_\mu(\mathbf{x}), \quad \tilde{\mathbf{y}}_{*\mu}(\mathbf{x}) = -\mathbf{z}_{*\mu}(\mathbf{x}),\tag{3.126}$$

$$\tilde{\mathbf{z}}_\mu(\mathbf{x}) = \mathbf{y}_\mu(\mathbf{x}), \quad \tilde{\mathbf{z}}_{*\mu}(\mathbf{x}) = -\mathbf{y}_{*\mu}(\mathbf{x}),\tag{3.127}$$

としても

$$\tilde{\mathbf{y}}_\mu(\mathbf{x}) = \mathbf{z}_{*\mu}(\mathbf{x}), \quad \tilde{\mathbf{y}}_{*\mu}(\mathbf{x}) = -\mathbf{z}_\mu(\mathbf{x}),\tag{3.128}$$

$$\tilde{\mathbf{z}}_\mu(\mathbf{x}) = \mathbf{y}_{*\mu}(\mathbf{x}), \quad \tilde{\mathbf{z}}_{*\mu}(\mathbf{x}) = -\mathbf{y}_\mu(\mathbf{x}),\tag{3.129}$$

としても同じ“規格化”(3.124), (3.125) を満たす. 今度は $\tilde{\mathbf{y}}_\mu(\mathbf{x})$ が属する固有値はそれぞれ $-E_\mu^*$, $-E_\mu$ である. このように 4 つ組の複素固有値のうち, どれを $\mathbf{y}_\mu(\mathbf{x})$ が属する固有値とするかは任

意に選ぶことができる. 従って縮退のある複素モードを考える場合, $\mathbf{y}_\mu(\mathbf{x})$ 間の縮退のみを考えれば十分である.

注目する準位 $E_\mu^{(0)}$ には r 個の固有関数 $\mathbf{y}_{\mu_1}^{(0)}(\mathbf{x}), \mathbf{y}_{\mu_2}^{(0)}(\mathbf{x}), \dots, \mathbf{y}_{\mu_r}^{(0)}(\mathbf{x})$ が縮退しているものとする. 実モードの議論と同様

$$\mathbf{y}_\mu^{(0)}(\mathbf{x}) = \sum_j^r \alpha_j \mathbf{y}_{\mu_j}^{(0)}(\mathbf{x}), \quad (3.130)$$

と書く. 1 次の BdG 方程式 (3.59) に代入し, 左から $\mathbf{y}_{\star\mu_i}^{(0)}(\mathbf{x})$ を内積させると

$$\sum_j^r \left[\left(\mathbf{y}_{\star\mu_i}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{\mu_j}^{(0)} \right) - E_\mu^{(1)} \delta_{ij} \right] \alpha_j = 0, \quad (3.131)$$

を得る. 従って $E_\mu^{(1)}$ は永年方程式

$$\begin{vmatrix} \left(\mathbf{y}_{\star\mu_1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{\mu_1}^{(0)} \right) - E_\mu^{(1)} & \left(\mathbf{y}_{\star\mu_1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{\mu_2}^{(0)} \right) & \cdots \\ \left(\mathbf{y}_{\star\mu_2}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{\mu_1}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{y}_{\star\mu_2}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{\mu_2}^{(0)} \right) - E_\mu^{(1)} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} = 0, \quad (3.132)$$

によって決定される.

このとき同時に $E_\mu^{(0)*}$ には $\mathbf{y}_{\star\mu_1}^{(0)}(\mathbf{x}), \mathbf{y}_{\star\mu_2}^{(0)}(\mathbf{x}), \dots, \mathbf{y}_{\star\mu_r}^{(0)}(\mathbf{x})$ が縮退している. 同じ議論により $E_{\star\mu}^{(1)}$ を決定する永年方程式は

$$\begin{vmatrix} \left(\mathbf{y}_{\mu_1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{\star\mu_1}^{(0)} \right) - E_{\star\mu}^{(1)} & \left(\mathbf{y}_{\mu_1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{\star\mu_2}^{(0)} \right) & \cdots \\ \left(\mathbf{y}_{\mu_2}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{\star\mu_1}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{y}_{\mu_2}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{\star\mu_2}^{(0)} \right) - E_{\star\mu}^{(1)} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} = 0, \quad (3.133)$$

であることが分かる. 内積の共役対称性と T' の擬エルミート性により直ちに, $E_{\star\mu}^{(1)} = E_\mu^{(1)*}$ となることが確認できる.

4 多重渦度を持つ凝縮体の不安定性

この章では円筒対称な調和振動子型ポテンシャル $V(r, z) = \frac{1}{2} M (\omega_\perp^2 r^2 + \omega_z^2 z^2)$ に捕捉された渦度 κ の量子渦を持つ凝縮体を考える. 3 章で定式化した手法を用いて相互作用 $g = 0$ 周りの摂動展開を考え, 相互作用が十分弱い状況下における複素固有値出現条件を導出する.

4.1 0 次及び 1 次の方程式

量子渦は z 軸に沿って存在するものとし, 秩序変数を

$$\xi(r, \theta, z) = \sqrt{\frac{N_c}{2\pi}} e^{i\kappa\theta} f(r, z) \quad (4.1)$$

と仮定する. ここでは一般性を損ねることなく渦度 κ を非負の整数にとる.

相互作用定数 g を $g = 0 + \varepsilon g'$ と書き換え、諸量を ε で展開し

$$\mathcal{L}_0 = K + V(r, z) - \mu^{(0)}, \quad (4.2)$$

$$\mathcal{L}' = -\mu^{(1)} + 2g'|\xi^{(0)}|^2, \quad (4.3)$$

$$\mathcal{M}_0 = 0, \quad (4.4)$$

$$\mathcal{M}' = g'\xi^{(0)2}, \quad (4.5)$$

を得る.

0 次の BdG 方程式は解析的に解くことができる :

$$\mathbf{y}_{n,\ell,m}^{(0)}(r, \theta, z) = \begin{pmatrix} U_{n,\ell,m}(r, \theta, z) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

$$\mathbf{z}_{n,\ell,m}^{(0)}(r, \theta, z) = \begin{pmatrix} 0 \\ U_{n,\ell,m}^*(r, \theta, z) \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

それぞれ固有値 $E_{n,\ell,m}^{(0)y} = \epsilon_{n,\ell,m}$, $E_{n,\ell,m}^{(0)z} = -\epsilon_{n,\ell,m}$ に属し、それぞれ 1, -1 に規格化されている. ここで $U_{n,\ell,m}$ は固有値方程式

$$\left[K + V(r, z) - \mu^{(0)} \right] U_{n,\ell,m}(r, \theta, z) = \epsilon_{n,\ell,m} U_{n,\ell,m}(r, \theta, z) \quad (4.8)$$

の固有関数である. この固有値問題はすぐに解くことができる :

$$U_{n,\ell,m}(r, \theta, z) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{i(\ell+\kappa)\theta} u_{n,\ell,m}(r, z), \quad (4.9)$$

$$u_{n,\ell,m}(r, z) = C_{n,\ell,m} e^{-\frac{1}{2}\alpha_\perp^2 r^2 - \frac{1}{2}\alpha_z^2 z^2} (\alpha_\perp r)^{|\ell+\kappa|} L_n^{|\ell+\kappa|}(\alpha_\perp^2 r^2) H_m(\alpha_z z), \quad (4.10)$$

$$\epsilon_{n,\ell,m} = \hbar\omega_\perp (2n + |\ell + \kappa| + 1) + \hbar\omega_z \left(m + \frac{1}{2} \right) - \mu^{(0)}. \quad (4.11)$$

ただし

$$C_{n,\ell,m} = \sqrt{\frac{\alpha_\perp^2 \alpha_z}{\pi^{3/2}}} \cdot \sqrt{\frac{n!}{2^m m! (|\ell + \kappa| + n)!}}, \quad (4.12)$$

$$\alpha_\perp = \sqrt{\frac{M\omega_\perp}{\hbar}}, \quad (4.13)$$

$$\alpha_z = \sqrt{\frac{M\omega_z}{\hbar}}, \quad (4.14)$$

である. 量子数 n, ℓ, m はそれぞれ $n = 0, 1, 2, \dots$, $\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $m = 0, 1, 2, \dots$. また $L_n^k(x)$, $H_m(x)$ はそれぞれ Laguerre 多項式, Hermite 多項式であり,

$$L_n^k(x) = e^x \frac{x^{-k}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+k}), \quad (4.15)$$

$$H_m(x) = (-1)^m e^{x^2} \frac{d^m}{dx^m} e^{-x^2}, \quad (4.16)$$

と定義されている。また 0 次の秩序変数と化学ポテンシャルは

$$\xi^{(0)}(r, \theta, z) = \sqrt{N} U_{0,0,0}(r, \theta, z), \quad (4.17)$$

$$\mu^{(0)} = \hbar\omega_{\perp}(\kappa + 1) + \frac{1}{2}\hbar\omega_z, \quad (4.18)$$

である。1 次の化学ポテンシャル $\mu^{(1)}$ を決めるためには、1 次の GP 方程式を考えなくてはならない：

$$\mathcal{L}_0 \xi^{(1)} + (\mathcal{L}' \xi^{(0)} - \mathcal{M}' \xi^{(0)*}) = 0. \quad (4.19)$$

左から $\xi^{(0)*}$ を掛けて全空間で積分することにより、

$$\begin{aligned} \mu^{(1)} &= g' \int d^3x |\xi^{(0)}|^4 \\ &= D \frac{(2\kappa)!}{(\kappa!)^2}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

を得る。ただし

$$D = \frac{g' N_c \alpha_{\perp}^2 \alpha_z}{8\pi^7 2^{2\kappa+2}}, \quad (4.21)$$

4.2 永年方程式の分解

さて、1 次で BdG 方程式に複素固有値が生まれるためには $\mathbf{y}^{(0)}(\mathbf{x})$ と $\mathbf{z}^{(0)}(\mathbf{x})$ 間の縮退が必要である。第 3 章で述べた通り、縮退のある場合では 1 次の固有値は永年方程式により決定される。永年方程式の中に現れる T' の行列要素は以下の 3 種類がある：

$$T'_{yy'} : \left(\mathbf{y}_{n,\ell,m}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n',\ell',m'}^{(0)} \right) = \delta_{\ell\ell'} \frac{g' N}{\pi} \iint dr dz \left[r u_{0,0,0}^2 u_{n,\ell,m} u_{n',\ell',m'} \right] - \delta_{nn'} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \mu^{(1)}, \quad (4.22)$$

$$T'_{zz'} : \left(\mathbf{z}_{n,\ell,m}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{n',\ell',m'}^{(0)} \right) = \delta_{\ell\ell'} \frac{g' N}{\pi} \iint dr dz \left[r u_{0,0,0}^2 u_{n,\ell,m} u_{n',\ell',m'} \right] - \delta_{nn'} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \mu^{(1)}, \quad (4.23)$$

$$T'_{yz'} : \left(\mathbf{y}_{n,\ell,m}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{n',\ell',m'}^{(0)} \right) = \delta_{\ell,-\ell'} \frac{g' N}{2\pi} \iint dr dz \left[r u_{0,0,0}^2 u_{n,\ell,m} u_{n',-\ell',m'} \right]. \quad (4.24)$$

これらの行列要素は永年方程式に現れるものであり、そのために量子数に制限がつく。つまり $T'_{yy'}$, $T'_{zz'}$ に関しては

$$\epsilon_{n,\ell,m} = \epsilon_{n',\ell',m'}, \quad (4.25)$$

$T'_{yz'}$ に関しては

$$\epsilon_{n,\ell,m} = -\epsilon_{n',\ell',m'}, \quad (4.26)$$

が成立している。

$T'_{yz'}$ に関して、 $\ell \neq -\ell'$ ならば $\left(\mathbf{y}_{n,\ell,m}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{n',\ell',m'}^{(0)} \right) = 0$ 。また $\ell = -\ell'$ であるとする、式 (4.26) より

$$\omega_{\perp} \left\{ 2(n + n') + |\ell + \kappa| + |\ell - \kappa| - 2\kappa \right\} + \omega_z(m + m') = 0, \quad (4.27)$$

を満たさなくてはならない。しかし $|\ell| > \kappa$ であるとする、

$$\begin{aligned}
 & \omega_{\perp} \left\{ 2(n+n') + |\ell + \kappa| + |\ell - \kappa| - 2\kappa \right\} + \omega_z(m+m') \\
 & \geq \omega_{\perp} \left\{ 2(n+n') + 2|\ell| - 2\kappa \right\} + \omega_z(m+m') \\
 & > 2\omega_{\perp}(n+n') + \omega_z(m+m') \\
 & \geq 0.
 \end{aligned} \tag{4.28}$$

従って式 (4.27) は満たされない。一方 $|\ell| \leq \kappa$ とすると、

$$\begin{aligned}
 & \omega_{\perp} \left\{ 2(n+n') + |\ell + \kappa| + |\ell - \kappa| - 2\kappa \right\} + \omega_z(m+m') \\
 & = 2\omega_{\perp}(n+n') + \omega_z(m+m').
 \end{aligned} \tag{4.29}$$

よって $n = n' = m = m' = 0$ のときのみ等号が成立する。以上より永年方程式に現れる $T'_{yz'}$ のタイプの行列要素のうち 0 にならないものは、 $\left(\mathbf{y}_{0,\ell,0}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{0,-\ell,0}^{(0)} \right)$ のみである。ただしここでは $|\ell| \leq \kappa$ でなければならない。

次に $T'_{yy'}$, $T'_{zz'}$ に関して、 $\ell \neq \ell'$ ならば

$$\left(\mathbf{y}_{n,\ell,m}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n',\ell',m'}^{(0)} \right) = 0, \tag{4.30}$$

$$\left(\mathbf{z}_{n,\ell,m}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{n',\ell',m'}^{(0)} \right) = 0, \tag{4.31}$$

である。また $\ell = \ell'$ であるとする、(4.25) より

$$2\omega_{\perp}(n - n') + \omega_z(m - m') = 0, \tag{4.32}$$

である。 $\omega_{\perp}$ と ω_z の比が有理数である特別な場合に限り、この等式を満たす n, n', m, m' の組は無数にある。ただし $n = m = 0$ の場合は、等号が成立するのは $n' = m' = 0$ のときに限ることを注意しておく。また $\omega_{\perp}$ と ω_z の比が無理数の場合、等号が成立するのは $n = n'$ かつ $m = m'$ の場合のみである。

以上より永年方程式の左辺は以下の 3 種類の行列式の積に分解できることが分かる：

$$\begin{aligned}
 \text{(i)} \quad & \left(\mathbf{y}_{n,\ell,m}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n,\ell,m}^{(0)} \right) - E^{(1)}, \\
 \text{(ii)} \quad & \left(\mathbf{z}_{n,\ell,m}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{n,\ell,m}^{(0)} \right) + E^{(1)}, \\
 \text{(iii)} \quad & \left| \begin{pmatrix} \left(\mathbf{y}_{0,\ell,0}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{0,\ell,0}^{(0)} \right) - E^{(1)} & \left(\mathbf{y}_{0,\ell,0}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{0,-\ell,0}^{(0)} \right) \\ \left(\mathbf{z}_{0,-\ell,0}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{0,\ell,0}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{z}_{0,-\ell,0}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{0,-\ell,0}^{(0)} \right) + E^{(1)} \end{pmatrix} \right|.
 \end{aligned}$$

ただし (iii) が現れるのは $|\ell| \leq \kappa$ の場合だけである。また $\omega_{\perp}$ と ω_z の比が有理数である特別な場

合, (i) と (ii) は

$$(i)', \quad \begin{vmatrix} \left(\mathbf{y}_{n,\ell,m}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n,\ell,m}^{(0)} \right) - E^{(1)} & \left(\mathbf{y}_{n,\ell,m}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n',\ell,m'}^{(0)} \right) & \cdots \\ \left(\mathbf{y}_{n',\ell,m'}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n,\ell,m}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{y}_{n',\ell,m'}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{n',\ell,m'}^{(0)} \right) - E^{(1)} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix},$$

$$(ii)', \quad \begin{vmatrix} \left(\mathbf{z}_{n,\ell,m}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{n,\ell,m}^{(0)} \right) + E^{(1)} & \left(\mathbf{z}_{n,\ell,m}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{n',\ell,m'}^{(0)} \right) & \cdots \\ \left(\mathbf{z}_{n',\ell,m'}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{n,\ell,m}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{z}_{n',\ell,m'}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{n',\ell,m'}^{(0)} \right) + E^{(1)} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix},$$

となる. このように r 方向と z 方向の励起が共鳴し, $E^{(1)}$ の形が変わってくる. しかし (iii) は変更を受けない.

4.2.1 分解の具体例 1

例えば $\omega_{\perp}$ と ω_z の比が無理数であり, $\kappa = 1$ のとき, $E^{(0)} = -\hbar\omega_{\perp}$ となる準位に注目することにする. この準位には $\mathbf{y}_{0,-1,0}^{(0)}(\mathbf{x})$, $\mathbf{z}_{0,1,0}^{(0)}(\mathbf{x})$, $\mathbf{z}_{0,-3,0}^{(0)}(\mathbf{x})$, $\mathbf{y}_{1,-1,0}^{(0)}(\mathbf{x})$ の 4 つの固有関数が縮退している. 従って $E^{(1)}$ を決定する永年方程式は以下の通り:

$$\begin{vmatrix} \left(\mathbf{y}_{0,-1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{0,-1}^{(0)} \right) - E^{(1)} & \left(\mathbf{y}_{0,-1}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{0,1}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{y}_{0,-1}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{0,-3}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{y}_{0,-1}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{1,-1}^{(0)} \right) \\ \left(\mathbf{z}_{0,1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{0,-1}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{z}_{0,1}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{0,1}^{(0)} \right) + E^{(1)} & \left(\mathbf{z}_{0,1}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{0,-3}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{z}_{0,1}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{1,-1}^{(0)} \right) \\ \left(\mathbf{z}_{0,-3}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{0,-1}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{z}_{0,-3}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{0,1}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{z}_{0,-3}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{0,-3}^{(0)} \right) + E^{(1)} & \left(\mathbf{z}_{0,-3}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{1,-1}^{(0)} \right) \\ \left(\mathbf{z}_{1,-1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{0,-1}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{z}_{1,-1}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{0,1}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{z}_{1,-1}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{0,-3}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{z}_{1,-1}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{1,-1}^{(0)} \right) + E^{(1)} \end{vmatrix} = 0. \quad (4.33)$$

ただし全ての固有関数について量子数 m は 0 なので省略した. 式 (4.22)-(4.24) で調べた性質を使えば

$$\begin{vmatrix} \left(\mathbf{y}_{0,-1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{0,-1}^{(0)} \right) - E^{(1)} & \left(\mathbf{y}_{0,-1}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{0,1}^{(0)} \right) & 0 & 0 \\ \left(\mathbf{z}_{0,1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{0,-1}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{z}_{0,1}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{0,1}^{(0)} \right) + E^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \left(\mathbf{z}_{0,-3}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{0,-3}^{(0)} \right) + E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \left(\mathbf{z}_{1,-1}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{1,-1}^{(0)} \right) + E^{(1)} \end{vmatrix} = 0. \quad (4.34)$$

つまり

$$\begin{vmatrix} \left(\mathbf{y}_{0,-1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{0,-1}^{(0)} \right) - E^{(1)} & \left(\mathbf{y}_{0,-1}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{0,1}^{(0)} \right) \\ \left(\mathbf{z}_{0,1}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{0,-1}^{(0)} \right) & \left(\mathbf{z}_{0,1}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{0,1}^{(0)} \right) + E^{(1)} \end{vmatrix} \times \left\{ \left(\mathbf{z}_{0,-3}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{0,-3}^{(0)} \right) + E^{(1)} \right\} \left\{ \left(\mathbf{z}_{1,-1}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{1,-1}^{(0)} \right) + E^{(1)} \right\} = 0, \quad (4.35)$$

となる. このようにして, 永年方程式の左辺は (i)–(iii) のより小さな行列式に分解される.

4.2.2 分解の具体例 2

先ほどと同じように $\kappa = 1$ において $E^{(0)} = -\hbar\omega_{\perp}$ となる準位に注目する. ただし今度は $\omega_{\perp}/\omega_z = 1$ の場合を考える. この準位に縮退している固有関数は先ほどの 4 つの他に, $z_{0,0,1}^{(0)}(\mathbf{x})$, $y_{0,-2,1}^{(0)}(\mathbf{x})$, $y_{0,-1,2}^{(0)}(\mathbf{x})$ の 3 つが加わる. 従って永年方程式は以下の様になる:

$$\begin{aligned} & \left| \begin{pmatrix} y_{0,-1,0}^{(0)} & T' y_{0,-1,0}^{(0)} \\ z_{0,1,0}^{(0)} & T' y_{0,-1,0}^{(0)} \end{pmatrix} - E^{(1)} \quad \begin{pmatrix} y_{0,-1,0}^{(0)} & T' z_{0,1,0}^{(0)} \\ z_{0,1,0}^{(0)} & T' z_{0,1,0}^{(0)} \end{pmatrix} + E^{(1)} \right| \\ & \times \left| \begin{pmatrix} z_{0,-1,0}^{(0)} & T' z_{0,-1,0}^{(0)} \\ z_{0,-1,2}^{(0)} & T' z_{0,-1,0}^{(0)} \end{pmatrix} + E^{(1)} \quad \begin{pmatrix} z_{0,-1,0}^{(0)} & T' z_{0,-1,2}^{(0)} \\ z_{0,-1,2}^{(0)} & T' z_{0,-1,2}^{(0)} \end{pmatrix} + E^{(1)} \right| \left\{ \begin{pmatrix} z_{0,-3,0}^{(0)} & T' z_{0,-3,0}^{(0)} \end{pmatrix} + E^{(1)} \right\} \\ & \times \left\{ \begin{pmatrix} z_{0,0,1}^{(0)} & T' z_{0,0,1}^{(0)} \end{pmatrix} + E^{(1)} \right\} \left\{ \begin{pmatrix} z_{0,-2,1}^{(0)} & T' z_{0,-2,1}^{(0)} \end{pmatrix} + E^{(1)} \right\} = 0. \quad (4.36) \end{aligned}$$

4.3 複素固有値出現条件

分解された行列式 (i)–(iii) のうち, (i) と (ii) は明らかに複素固有値を引き起こさない. 唯一複素固有値を引き起こす可能性があるのは, (iii) のみである. また $\omega_{\perp}$ と ω_z の比が有理数である特別な場合, 変更を受けるのは (i) と (ii) のみであり, これは複素固有値出現には関係しない.

(iii) から生まれる固有値 $E^{(0)}$ は, 方程式

$$\left| \begin{pmatrix} y_{0,\ell,0}^{(0)} & T' y_{0,\ell,0}^{(0)} \\ z_{0,-\ell,0}^{(0)} & T' y_{0,\ell,0}^{(0)} \end{pmatrix} - E^{(1)} \quad \begin{pmatrix} y_{0,\ell,0}^{(0)} & T' z_{0,-\ell,0}^{(0)} \\ z_{0,-\ell,0}^{(0)} & T' z_{0,-\ell,0}^{(0)} \end{pmatrix} + E^{(1)} \right| = 0, \quad (4.37)$$

により決定される. この $E^{(0)}$ が複素固有値となるのは,

$$\left| \begin{pmatrix} y_{0,\ell,0}^{(0)} & T' y_{0,\ell,0}^{(0)} \\ z_{0,-\ell,0}^{(0)} & T' y_{0,\ell,0}^{(0)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} z_{0,-\ell,0}^{(0)} & T' z_{0,-\ell,0}^{(0)} \end{pmatrix} \right| < 2 \left| \begin{pmatrix} z_{0,-\ell,0}^{(0)} & T' y_{0,\ell,0}^{(0)} \end{pmatrix} \right|. \quad (4.38)$$

のときである. ここに現れる全ての行列要素は計算できる:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} y_{0,\ell,0}^{(0)} & T' y_{0,\ell,0}^{(0)} \end{pmatrix} &= \frac{g'N}{\pi} \iint dr dz r u_{0,0,0}^2 u_{0,\ell,0} u_{0,\ell,0} - \mu^{(1)} \\ &= 2D \frac{(2\kappa + \ell)!}{\kappa! (\kappa + \ell)!} \frac{1}{2^\ell} - \mu^{(1)}, \end{aligned} \quad (4.39)$$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} z_{0,-\ell,0}^{(0)} & T' z_{0,-\ell,0}^{(0)} \end{pmatrix} &= \frac{g'N}{\pi} \iint dr dz r u_{0,0,0}^2 u_{0,-\ell,0} u_{0,-\ell,0} + \mu^{(1)} \\ &= 2D \frac{(2\kappa - \ell)!}{\kappa! (\kappa - \ell)!} \frac{1}{2^{-\ell}} - \mu^{(1)}, \end{aligned} \quad (4.40)$$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} y_{0,\ell,0}^{(0)} & T' z_{0,-\ell,0}^{(0)} \end{pmatrix} &= \frac{g'N}{2\pi} \iint dr dz r u_{0,0,0}^2 u_{0,\ell,0} u_{0,-\ell,0} \\ &= D \frac{(2\kappa)!}{\kappa! \sqrt{(\kappa + \ell)! (\kappa - \ell)!}}. \end{aligned} \quad (4.41)$$

さらに式 (4.20) を代入し, 複素固有値出現条件

$$\left| \frac{(2\kappa + \ell)!}{2^\ell \kappa! (\kappa + \ell)!} + \frac{(2\kappa - \ell)!}{2^{-\ell} \kappa! (\kappa - \ell)!} - \frac{(2\kappa)!}{(\kappa!)^2} \right| < \frac{(2\kappa)!}{\kappa! \sqrt{(\kappa + \ell)! (\kappa - \ell)!}}, \quad (4.42)$$

を得る.

$\kappa \backslash \ell $	0	1	2	3	4	5	6	...
0								
1								
2			×					
3			×	×				
4			×	×				
5			×	×	×			
6			×	×	×			
7			×	×	×			
8			×	×	×	×		
⋮								

表 4.1: 複素固有値が出現するパラメータ領域. × が記されたパラメータで複素固有値が出現する. また, 影の部分は正ノルムと負ノルムの固有関数による縮退が存在する領域. この縮退が存在しても条件式 (4.42) が満たされなければ複素固有値は出現しない.

条件式 (4.42) は $\kappa = 1$ では満たされず, $\kappa = 2$ では $|\ell| = 2$, $\kappa = 3$ では $|\ell| = 2, 3$ のときのみ満たされる. この結果は BdG 方程式の数値計算の結果 [22, 23] を再現している. また, 我々のグループが行った RK の方法による解析 [37] の結果も再現する. その解析では 2 モード近似が重要であったが, 何故それが妥当であったかは明らかにすることができなかった. 本研究では, (iii) から分かるように, この系では 2 つのモードしか複素固有値出現には関与しないことが示され, 先の解析における 2 モード近似の有効性も確認された.

5 光学格子中を流れる凝縮体の不安定性

この章では光学格子 $V(x) = v \cos Gx$ 中を流れる凝縮体を考える. ただし $G = \frac{2\pi}{d}$ は単位逆格子ベクトルである. 3 章で定式化した手法を用いて $v = 0$ 周りの摂動展開を考え, 光学格子が十分弱い状況下における複素固有値出現条件を導出する. ただしここでは $g > 0$, $0 \leq k \leq G/2$ の範囲のみを考える. また GP 方程式の定常解は Bloch 条件に従うものとする:

$$\xi(x) = e^{ikx} \xi_k(x), \quad \xi_k(x) = \xi_k(x + d). \quad (5.1)$$

5.1 光学格子中を流れる凝縮体に対する Bogoliubov–de Gennes 方程式

2 章にて導出した BdG 方程式をそのまま使うより, 定常解が Bloch 条件に従うことを反映させた BdG 方程式を用いるほうが議論が見えやすい. そこでこの節では, 改めて光学格子中を流れる凝縮体に対する BdG 方程式を導出する.

まず $\xi(x)$ に対する GP 方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + v \cos Gx + g|\xi(x)|^2 - \mu \right] \xi(x) = 0, \quad (5.2)$$

であるので, $\xi_k(x)$ に対する GP 方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{d}{dx} + ik \right)^2 + v \cos Gx + g|\xi_k(x)|^2 - \mu \right] \xi_k(x) = 0, \quad (5.3)$$

となる. 次に

$$\Psi(x, t) = e^{ikx} (\xi_k(x) + \delta\Psi_k(x, t)), \quad (5.4)$$

$$\delta\Psi(x, t) = u_k(x) e^{-iE_k t/\hbar} + v_k^*(x) e^{iE_k^* t/\hbar}, \quad (5.5)$$

と定常状態から微小に変位させ, TDGP 方程式を線形化することで BdG 方程式

$$T \mathbf{y}_k(x) = E_k \mathbf{y}_k(x), \quad (5.6)$$

を得る. ここで

$$T = \begin{pmatrix} \mathcal{L} & \mathcal{M} \\ -\mathcal{M}^* & -\mathcal{L}^* \end{pmatrix}, \quad (5.7)$$

$$\mathbf{y}_k(x) = \begin{pmatrix} u_k(x) \\ v_k(x) \end{pmatrix}, \quad (5.8)$$

$$\mathcal{L} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{d}{dx} + ik \right)^2 + v \cos Gx + 2g|\xi_k(x)|^2 - \mu, \quad (5.9)$$

$$\mathcal{M} = g\xi_k(x)^2, \quad (5.10)$$

である. 新たに T の (2,2) 成分に複素共役が付くが, BdG 方程式の持つ重要な対称性

$$\sigma_1 T \sigma_1 = -T^*, \quad \sigma_3 T \sigma_3 = T^\dagger, \quad (5.11)$$

が破られていないことを強調しておく. 従って 3 章で定式化した手法は, この BdG 方程式に対しても同様に適用することができる.

5.2 0 次及び 1 次の方程式

5.2.1 Gross–Pitaevskii 方程式

光学格子が弱い極限を考えるために $v \rightarrow \varepsilon v'$ と置き換え, ε についての摂動展開を考える. これに伴い諸量を ε で展開し, 0 次の GP 方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{d}{dx} + ik \right)^2 - \mu^{(0)} + g|\xi_k^{(0)}(x)|^2 \right] \xi_k^{(0)}(x) = 0, \quad (5.12)$$

及び, 1 次の GP 方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{d}{dx} + ik \right)^2 - \mu^{(0)} + g |\xi_k^{(0)}(x)|^2 \right] \xi_k^{(1)}(x) + \left[v' \cos Gx - \mu^{(1)} + g \xi_k^{(0)}(x) \left(\xi_k^{(1)}(x) + \xi_k^{(1)*}(x) \right) \right] \xi_k^{(0)}(x) = 0,$$

を得る.

0 次の GP 方程式では空間的に一様な解を仮定して

$$\xi_k^{(0)}(x) = \sqrt{n_c}, \quad (5.13)$$

$$\mu^{(0)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} + g n_c, \quad (5.14)$$

とする. これより 1 次の GP 方程式 (5.13) は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{d}{dx} + ik \right)^2 - \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \right] \xi_k^{(1)}(x) + \sqrt{n_c} \left(v' \cos Gx - \mu^{(1)} \right) + g n_c \left(\xi_k^{(1)}(x) + \xi_k^{(1)*}(x) \right) = 0, \quad (5.15)$$

となる. これを解くために, $\xi_k^{(1)}(x)$ が周期 d の周期関数であることに注目して,

$$\xi_k^{(1)}(x) = \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} w_{\ell} e^{i\ell Gx}, \quad (5.16)$$

と展開する. すると

$$\Delta E_{\ell G+k} w_{\ell} + \frac{1}{2} \sqrt{n_c} v' (\delta_{\ell,1} + \delta_{\ell,-1}) - \sqrt{n_c} \mu^{(1)} \delta_{\ell,0} + g n_c (w_{\ell} + w_{-\ell}^*) = 0. \quad (5.17)$$

ただし

$$\Delta E_K = \frac{\hbar^2}{2M} (K^2 - k^2), \quad (5.18)$$

と置いた. $\ell = 0$ では

$$-\sqrt{n_c} \mu^{(1)} + g n_c (w_0 + w_0^*) = 0, \quad (5.19)$$

となる. ここで

$$\begin{aligned} \|\xi_k\|^2 &= \int dx \left| \xi_k^{(0)}(x) + \varepsilon \xi_k^{(1)}(x) + O(\varepsilon^2) \right|^2 \\ &= \int dx \left| \sqrt{n_c} + \varepsilon w_0 + \varepsilon w_1 e^{iGx} + \varepsilon w_{-1} e^{-iGx} \right|^2 + O(\varepsilon^2) \\ &= N_c + \varepsilon L (w_0 + w_0^*) + O(\varepsilon^2). \end{aligned} \quad (5.20)$$

規格化条件より $w_0 + w_0^* = 0$, つまり w_0 は純虚数である. これは $\xi_k^{(0)}(x)$ の位相に吸収させることができるため, $w_0 = 0$ としてよい. (5.19) より $\mu^{(1)} = 0$ であることが分かる.

さて $|\ell| \geq 2$ では

$$\Delta E_{\ell G+k} w_{\ell} + g n_c (w_{\ell} + w_{-\ell}^*) = 0, \quad (5.21)$$

であるため, $\ell \rightarrow -\ell$ とし複素共役をとると

$$\begin{pmatrix} \Delta E_{\ell G+k} + gn_c & gn_c \\ gn_c & \Delta E_{\ell G-k} + gn_c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_\ell \\ w_{-\ell}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.22)$$

が成立する. ここで行列式は

$$\begin{aligned} & \begin{vmatrix} \Delta E_{\ell G+k} + gn_c & gn_c \\ gn_c & \Delta E_{\ell G-k} + gn_c \end{vmatrix} \\ &= \Delta E_{\ell G+k} \Delta E_{\ell G-k} + gn_c (\Delta E_{\ell G+k} + \Delta E_{\ell G-k}) \\ &> 0, \end{aligned} \quad (5.23)$$

であるため, $|\ell| \geq 2$ において $w_\ell = 0$ である. なおここで

$$\begin{aligned} \Delta E_{\ell G \pm k} &= \frac{\hbar^2}{2M} \{(\ell G \pm k)^2 - k^2\} \\ &= \frac{\hbar^2}{2M} \ell G (\ell G \pm 2k) \\ &\geq 0, \end{aligned} \quad (5.24)$$

であることを用いた. ただし不等式の評価では $0 \leq k \leq G/2$ を使った.

最後に $|\ell| = 1$ のときを考えると

$$\begin{pmatrix} \Delta E_{G+k} + gn_c & gn_c \\ gn_c & \Delta E_{G-k} + gn_c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_{-1}^* \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \sqrt{n_c} v' \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (5.25)$$

となる. これより

$$w_{\pm 1} = -\frac{\sqrt{n_c} v'}{2} \frac{\Delta E_{G \mp k}}{\Delta E_{G+k} \Delta E_{G-k} + gn_c (\Delta E_{G+k} + \Delta E_{G-k})}, \quad (5.26)$$

である.

以上までで 1 次の GP 方程式が解くことができた:

$$\xi_k^{(1)}(x) = w_1 e^{iGx} + w_{-1} e^{-iGx}, \quad (5.27)$$

$$\mu^{(1)} = 0. \quad (5.28)$$

なお

$$\begin{aligned} |\xi_k(x)|^2 &= |\xi_k^{(0)}(x) + \varepsilon \xi_k^{(1)}(x)|^2 + O(\varepsilon^2) \\ &= n_c + 2\varepsilon \sqrt{n_c} (w_1 + w_{-1}) \cos Gx + O(\varepsilon^2), \end{aligned} \quad (5.29)$$

であり, 1 次の範囲では $|\xi_k(x)|^2$ は空間反転に関して対称であることが確認された.

5.2.2 Bogoliubov–de Gennes 方程式

0 次の BdG 方程式は

$$\begin{pmatrix} \mathcal{L}_0 & \mathcal{M}_0 \\ -\mathcal{M}_0^* & -\mathcal{L}_0^* \end{pmatrix} \mathbf{y}_k^{(0)}(x) = E_k^{(0)} \mathbf{y}_k^{(0)}(x). \quad (5.30)$$

ただし

$$\mathcal{L}_0 = -\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{d}{dx} + ik \right)^2 - \frac{\hbar^2 k^2}{2M} + gn_c, \quad (5.31)$$

$$\mathcal{M}_0 = gn_c. \quad (5.32)$$

これを解くために

$$\mathbf{y}_k^{(0)}(x) = \sum_{q=-\infty}^{\infty} \tilde{\mathbf{y}}_{kq}^{(0)} e^{iqk}, \quad (5.33)$$

と展開する. ただし $q = 2\pi n/L$ (n は整数) である. BdG 方程式は q に関して対角的になり

$$\begin{pmatrix} \Delta E_{q+k} + gn_c & gn_c \\ -gn_c & -\Delta E_{q-k} - gn_c \end{pmatrix} \tilde{\mathbf{y}}_{kq}^{(0)} = E_{kq}^{(0)} \tilde{\mathbf{y}}_{kq}^{(0)}, \quad (5.34)$$

である. 固有値は

$$\begin{aligned} E_{kq}^{(0)} &= \frac{1}{2} \left[\Delta E_{q+k} - \Delta E_{q-k} \pm \sqrt{(\Delta E_{q+k} + \Delta E_{q-k})^2 + 4gn_c(\Delta E_{q+k} + \Delta E_{q-k})} \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{M} qk \pm \sqrt{\frac{\hbar^2 q^2}{2M} \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2M} + 2gn_c \right)}, \\ &= \frac{1}{2} (\tilde{\epsilon}_{q+k} - \tilde{\epsilon}_{q-k}) \pm \tilde{E}_q, \end{aligned} \quad (5.35)$$

である. ただし

$$\epsilon_q = \frac{\hbar^2 q^2}{2M}, \quad (5.36)$$

$$\tilde{\epsilon}_q = \epsilon_q + gn_c, \quad (5.37)$$

$$\tilde{E}_q = \sqrt{\epsilon_q(\epsilon_q + 2gn_c)}, \quad (5.38)$$

とした.

固有値 $E_{kq}^{(0)y} = \frac{1}{2} (\tilde{\epsilon}_{q+k} - \tilde{\epsilon}_{q-k}) + \tilde{E}_q$ に属する固有関数 $\mathbf{y}_{kq}^{(0)}(x)$ は

$$\mathbf{y}_{kq}^{(0)}(x) = e^{iqx} \frac{1}{\sqrt{2L\tilde{E}_q}} \begin{pmatrix} \sqrt{\tilde{\epsilon}_q - \tilde{E}_q} \\ -\sqrt{\tilde{\epsilon}_q + \tilde{E}_q} \end{pmatrix}. \quad (5.39)$$

固有値 $E_{kq}^{(0)z} = \frac{1}{2} (\tilde{\epsilon}_{q+k} - \tilde{\epsilon}_{q-k}) - \tilde{E}_q$ に属する固有関数 $\mathbf{z}_{kq}^{(0)}(x)$ は

$$\mathbf{z}_{kq}^{(0)}(x) = e^{iqx} \frac{1}{\sqrt{2L\tilde{E}_q}} \begin{pmatrix} -\sqrt{\tilde{\epsilon}_q + \tilde{E}_q} \\ \sqrt{\tilde{\epsilon}_q - \tilde{E}_q} \end{pmatrix}. \quad (5.40)$$

それぞれ $\|\mathbf{y}_{kq}^{(0)}\|^2 = 1, \|\mathbf{z}_{kq}^{(0)}\|^2 = -1$ と規格化されている. ここで $\mathbf{y}_{kq}^{(0)}(x)$ と $\mathbf{z}_{kq}^{(0)}(x)$ との間には $\mathbf{z}_{kq}^{(0)}(x) = \sigma_1 \mathbf{y}_{k,-q}^{(0)*}(x)$ という対称性がある. ここで $\mathbf{z}_{kq}^{(0)}(x)$ を $\mathbf{z}_{kq}^{(0)}(x) = \sigma_1 \mathbf{y}_{k,q}^{(0)*}(x)$ と定義しなかったのは, 単に表記の利便さによるもので本質的なものではない.

5.3 有効な縮退

ここでは固有値が負になるものだけを考える. すると対称性により固有値が正の場合も分かるので, これで十分である. $\mathbf{y}^{(0)}(x)$ と $\mathbf{z}^{(0)}(x)$ の縮退を調べる前に, まずは $E_{kq}^{(0)y} < 0$ となるパラメータ領域を調べる:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} (\tilde{\epsilon}_{q+k} - \tilde{\epsilon}_{q-k}) + \tilde{E}_q < 0, \\ \Leftrightarrow & \sqrt{q^2 \left(q^2 + \frac{G^2 g n_c}{2E_{\text{rec}}} \right)} < -2qk. \end{aligned} \quad (5.41)$$

ただし

$$E_{\text{rec}} = \epsilon_{G/2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2}, \quad (5.42)$$

は光学格子を作るレーザーによる反跳エネルギーである. ここで

$$\sqrt{q^2 \left(q^2 + \frac{G^2 g n_c}{2E_{\text{rec}}} \right)} > q^2, \quad (5.43)$$

より, 条件 (5.41) が満たされるには

$$\begin{aligned} & q^2 < -2qk, \\ \Leftrightarrow & -2k < q < 0. \end{aligned} \quad (5.44)$$

が必要であることが分かる. 一方 $0 \leq k \leq \frac{G}{2}$ なので, q は $-G < q < 0$ の範囲を考えればよい.

たとえ $\mathbf{y}^{(0)}(x)$ と $\mathbf{z}^{(0)}(x)$ とが縮退していたとしても, 永年方程式に現れる内積 $(\mathbf{y}_{kq}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{kq'}^{(0)})$ が 0 であれば, 複素固有値を引き起こさない. いま

$$\mathcal{L}' = v' \cos Gx + 2g\sqrt{n_c} (\xi_k(x) + \xi_k^*(x)) - \mu^{(1)}, \quad (5.45)$$

$$\mathcal{M}' = 2g\sqrt{n_c} \xi_k^{(1)}(x), \quad (5.46)$$

であるから

$$(\mathbf{y}_{kq}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{kq'}^{(0)}) = \int dx e^{-i(q-q')x} (A + B e^{iGx} + C e^{-iGx}). \quad (5.47)$$

従ってこの内積が消えないためには, ℓ を整数として $q' = q + \ell G$ が成立している必要がある.

さて, $E_{kq}^{(0)y} = E_{k,q+\ell G}^{(0)z}$ とは

$$\sqrt{q^2 \left(q^2 + \frac{G^2 g n_c}{2E_{\text{rec}}} \right)} + \sqrt{(q + \ell G)^2 \left((q + \ell G)^2 + \frac{G^2 g n_c}{2E_{\text{rec}}} \right)} = 2\ell Gk, \quad (5.48)$$

である。等号成立のためには $\ell > 0$ が必要。また式 (5.43) のため、以下の不等号が成立していなくてはならない。

$$q^2 + (g + \ell G)^2 < 2\ell Gk. \quad (5.49)$$

この不等式を解くと

$$k - q - \sqrt{k^2 - 2kq - q^2} < \ell G < k - q + \sqrt{k^2 - 2kq - q^2}, \quad (5.50)$$

となる。ところで

$$k - q + \sqrt{k^2 - 2kq - q^2} < \frac{G}{2} + G + \frac{G}{2} = 2G, \quad (5.51)$$

であるから、等号成立には $0 < \ell G < 2G$ が必要。つまり $\ell = 1$ でなくてはならない。

$\ell = 1$ として、もう一度式 (5.48) を見る。式 (5.48) の左辺

$$f(q) \equiv \sqrt{q^2 \left(q^2 + \frac{G^2 g n_c}{2E_{\text{rec}}} \right)} + \sqrt{(q + G)^2 \left((q + G)^2 + \frac{G^2 g n_c}{2E_{\text{rec}}} \right)}, \quad (5.52)$$

は

$$f'(-\frac{G}{2}) = 0, \quad f''(q) > 0, \quad (5.53)$$

を満たすため、 $q = -G/2$ で最小値 $f(-\frac{G}{2}) = \frac{G}{2} \sqrt{1 + \frac{2g n_c}{E_{\text{rec}}}}$ をとる。従って縮退の条件 (5.48) を満たすための k の必要条件として

$$k > \frac{G}{4} \sqrt{1 + \frac{2g n_c}{E_{\text{rec}}}} \equiv k_c, \quad (5.54)$$

を得る。もし $\mathbf{y}^{(0)}(x)$ と $\mathbf{z}^{(0)}(x)$ と間の縮退がなければ、摂動の範囲で複素固有値が引き起こされなため、凝縮体は動的安定である。この議論には外部ポテンシャルの情報を使用していない。従って次のことが外部ポテンシャルの形に依らず結論される：斥力相互作用が働く様な凝縮体に弱い外部ポテンシャルを加えた場合、凝縮体の流れが臨界値 k_c よりも遅く $|k| \leq k_c$ であれば、凝縮体は動的安定である。臨界値 k_c は外部ポテンシャルの周期が短く、相互作用が強いほど、大きくなる。

最後に $\mathbf{y}^{(0)}(x)$ と $\mathbf{z}^{(0)}(x)$ の縮退が起きるとき、有効な縮退は 2 重縮退しか起こらないことを示す。まず $-2k < q < 0$ の $\mathbf{y}_{kq}^{(0)}(x)$ に対して、有効な縮退は $\mathbf{z}_{k,q+G}^{(0)}(x)$ のみ。つまり $\mathbf{z}^{(0)}(x)$ 同士の縮退はない。一方 $-G < q < 0$ でなくては $E_{kq}^{(0)y} < 0$ になれないのだから、0 でない整数 ℓ に対して $E_{k,q+\ell G}^{(0)y} \geq 0$ である。そのため $E_{kq}^{(0)y} \neq E_{k,q+\ell G}^{(0)y}$ となる。以上で $\mathbf{y}^{(0)}(x)$ と $\mathbf{z}^{(0)}(x)$ の縮退が起きるとき、有効な 2 重縮退しか起こらないことが示された。

5.4 複素固有値出現条件

以上の準備のもとに永年方程式を解き、複素固有値出現条件を導出する。まず

$$T' = \begin{pmatrix} \mathcal{L}' & \mathcal{M}' \\ -\mathcal{M}'^* & -\mathcal{L}' \end{pmatrix}, \quad (5.55)$$

の縮退した固有関数による行列要素を計算する。ただし,

$$\mathcal{L}' = v' \cos Gx + 2g\sqrt{n_c} \left(\xi_k^{(1)}(x) + \xi_k^{(1)*}(x) \right), \quad (5.56)$$

$$\mathcal{M}' = 2g\sqrt{n_c} \xi_k^{(1)}(x), \quad (5.57)$$

$$\xi_k^{(1)}(x) = w_1 e^{iGx} + w_{-1} e^{-iGx}, \quad (5.58)$$

である。既に示した通り、複素固有値を引き起こす縮退は次の固有関数による 2 重縮退しかない:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{kq}^{(0)}(x) &= e^{iqx} \frac{1}{\sqrt{2L\tilde{E}_q}} \begin{pmatrix} \sqrt{\tilde{\epsilon}_q - \tilde{E}_q} \\ -\sqrt{\tilde{\epsilon}_q + \tilde{E}_q} \end{pmatrix} \\ &\equiv \frac{e^{iqx}}{\sqrt{L}} \begin{pmatrix} u_y \\ v_y \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5.59)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{z}_{k,q+G}^{(0)}(x) &= e^{i(q+G)x} \frac{1}{\sqrt{2L\tilde{E}_{q+G}}} \begin{pmatrix} -\sqrt{\tilde{\epsilon}_{q+G} + \tilde{E}_{q+G}} \\ \sqrt{\tilde{\epsilon}_{q+G} - \tilde{E}_{q+G}} \end{pmatrix} \\ &\equiv \frac{e^{i(q+G)x}}{\sqrt{L}} \begin{pmatrix} u_z \\ v_z \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.60)$$

T' には e^{iGx} か e^{-iGx} を含んだ項しか存在しないため対角成分は 0 になる。

$$\left(\mathbf{y}_{kq}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{kq}^{(0)} \right) = \frac{1}{L} \int dx \begin{pmatrix} u_y & v_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{L}' & \mathcal{M}' \\ \mathcal{M}' & \mathcal{L}' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_y \\ v_y \end{pmatrix} = 0, \quad (5.61)$$

$$\left(\mathbf{z}_{k,q+G}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{k,q+G}^{(0)} \right) = \frac{1}{L} \int dx \begin{pmatrix} u_z & v_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{L}' & \mathcal{M}' \\ \mathcal{M}' & \mathcal{L}' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_z \\ v_z \end{pmatrix} = 0. \quad (5.62)$$

一方、非対角成分は

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{y}_{k,q}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{k,q+G}^{(0)} \right) &= \frac{1}{L} \int dx e^{iGx} \begin{pmatrix} u_y & v_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{L}' & \mathcal{M}' \\ \mathcal{M}' & \mathcal{L}' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_z \\ v_z \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} u_y & v_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}v' + 2g\sqrt{n_c}(w_1 + w_{-1}) & 2g\sqrt{n_c}w_{-1} \\ 2g\sqrt{n_c}w_1 & \frac{1}{2}v' + 2g\sqrt{n_c}(w_1 + w_{-1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_z \\ v_z \end{pmatrix} \\ &\equiv \Delta, \end{aligned} \quad (5.63)$$

と $g \neq 0$ ならば、一般には 0 にならない。これより永年方程式は

$$\begin{vmatrix} -E_{kq}^{(1)} & \Delta \\ -\Delta^* & E_{kq}^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \quad (5.64)$$

となり、1 次の固有値 $E_{kq}^{(1)}$ は

$$E_{kq}^{(1)} = \pm i|\Delta|, \quad (5.65)$$

と複素数になる。

以上より, $0 \leq k \leq \frac{G}{2}$ の範囲で複素数固有値が現れるのは $E_{kq}^{(0)y} = E_{k,q+\ell G}^{(0)z}$ が満たされるとき, つまり

$$\sqrt{q^2 \left(q^2 + \frac{G^2 g n_c}{2E_{\text{rec}}} \right)} + \sqrt{(q+G)^2 \left((q+G)^2 + \frac{G^2 g n_c}{2E_{\text{rec}}} \right)} = 2Gk, \quad (5.66)$$

が満たされるときであることが求められた. ただしここで q は $-\infty < q < \infty$ の範囲を動いてよい. しかし既に示した通り縮退条件 (5.66) が成立するためには, $-G < q < 0$ であることが必要である. ここで q を還元ゾーン形式を使って $q = \tilde{q} + Gl$ と書くことにする. l はバンド指数であり, $\tilde{q}$ は $-G/2 \leq \tilde{q} \leq G/2$ を満たす. これより複素固有値出現条件を書き換える:

$$\begin{cases} \sqrt{\tilde{q}^2 \left(\tilde{q}^2 + \frac{G^2 g n_c}{2E_{\text{rec}}} \right)} + \sqrt{(\tilde{q}+G)^2 \left((\tilde{q}+G)^2 + \frac{G^2 g n_c}{2E_{\text{rec}}} \right)} = 2Gk & (-G/2 \leq \tilde{q} \leq 0 \text{ のとき}), \\ \sqrt{(\tilde{q}-G)^2 \left((\tilde{q}-G)^2 + \frac{G^2 g n_c}{2E_{\text{rec}}} \right)} + \sqrt{\tilde{q}^2 \left(\tilde{q}^2 + \frac{G^2 g n_c}{2E_{\text{rec}}} \right)} = 2Gk & (0 \leq \tilde{q} \leq G/2 \text{ のとき}). \end{cases} \quad (5.67)$$

この条件は $\tilde{q}$ に関して偶なので, $0 \leq \tilde{q} \leq G/2$ の部分だけ考えれば十分である. これは Wu 等 [25, 26] が行った BdG 方程式における数値計算の結果を良く表している. Wu 等も光学格子ポテンシャルが弱い状況下における複素固有値の出現条件が, 縮退条件 $E_{kq}^{(0)y} = E_{k,q+G}^{(0)z}$ に関係していることを指摘しているが, これに関する理論的な説明は与えていなかった. 本研究では BdG 方程式に対して光学格子ポテンシャルの強さ v による摂動計算を行うことで, この縮退が複素固有値を引き起こしていることを解析的に示した. この結果は Taylor 等 [31] による先行研究の結果を再現する.

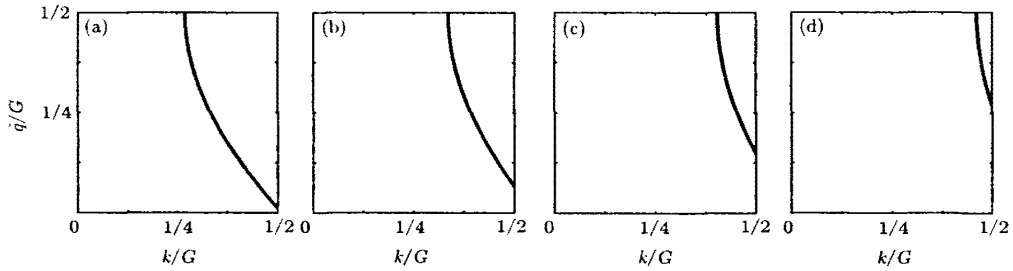


図 5.1: 複素固有値が出現するパラメータ領域. 実線部では 0 次の BdG 方程式に正ノルムと負ノルムの固有関数による縮退があり, 1 次の固有値に複素数が出る. また影の部分は正ノルムに負の固有値が存在し, Landau 不安定性を示す領域. 相互作用定数の強さはそれぞれ (a) $gn_c = 0.08E_{\text{rec}}$, (b) $gn_c = 0.4E_{\text{rec}}$, (c) $gn_c = 0.8E_{\text{rec}}$, (d) $gn_c = 1.2E_{\text{rec}}$. 複素固有値が出現するための k の最小値 k_c は相互作用が強くなるにつれて増加する.

さらに強調すべき点は, この章で行った解析は摂動ポテンシャルの形を本質的には使っていないということである. この章では, 先行研究の数値計算の設定, 実際の実験設定と対応して摂動ポテンシャルとして $\cos$ 型の光学格子ポテンシャルを用いた. しかし周期的な摂動ポテンシャルであれば, ポテンシャルの具体形に依らず同じ複素固有値出現条件が得られる. このことは以下のように確認される. まず 0 次の議論は影響を受けない. さらに 1 次の GP 方程式は式 (5.27) の形ではなく $e^{i\ell Gx}$ ($|\ell| \neq 1$) の項も含むようになる. ただし定数項がないことだけは示される:

$$\xi_k^{(1)}(x) = \sum_{\ell \neq 0} w_\ell e^{i\ell Gx}. \quad (5.68)$$

このため $\mathcal{L}'$ と M' にも定数項が含まれない. 従って

$$\left(\mathbf{y}_{kq}^{(0)}, T' \mathbf{y}_{kq}^{(0)} \right) = 0, \quad (5.69)$$

$$\left(\mathbf{z}_{k,q+G}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{k,q+G}^{(0)} \right) = 0, \quad (5.70)$$

$$\left(\mathbf{y}_{kq}^{(0)}, T' \mathbf{z}_{k,q+G}^{(0)} \right) = \Delta, \quad (5.71)$$

であり, 1 次の固有値 $E_{kq}^{(1)}$ の形は式 (5.65) と変わらない. ただし Δ の値は考える摂動ポテンシャルの具体形によって変化する. このようにして, 周期的な摂動ポテンシャルを加えた場合そのポテンシャルの具体形に依らず, 複素固有値出現条件は式 (5.67) で与えられることが示された.

6 まとめと展望

本論文では BdG 方程式における複素固有値出現条件を導出することにより, 中性原子 BEC における不安定性の解析を行った. 以下では本研究の成果と今後の課題を述べる.

第 2 章では中性原子気体を記述する作用を与え, 中性原子 BEC のハミルトニアンを導出した. また凝縮体に従う方程式である TDGP 方程式, 定常状態に対する GP 方程式, また凝縮体の安定性を議論するのに必要な BdG 方程式を導出した. 最後に渦を持つ凝縮体, 光学格子中を流れる凝縮体に注目し, その定常状態における振る舞いを整理した.

第 3 章では BdG 方程式に対する摂動計算を行うことで, 複素固有値出現条件を導出した. BdG 方程式に対する摂動計算の定式化を行うために, まず BdG 方程式の持つ性質詳しくを調べた. この際, 固有関数間に不定計量の内積を定義することが重要であった. それに伴い固有関数は正ノルム, 負ノルム, ゼロノルムの 3 種類に分類される. 続いて BdG 方程式に対する摂動計算の定式化を行い, 複素固有値出現には正ノルムと負ノルムの固有関数による縮退が必要であることをモデルによらず一般的に示した. また BdG 方程式が持っている性質である不定計量内積の元での直交性, 固有値に対する規則性が摂動 1 次のオーダーでも確かに守られていることを確認することで, 計算の自己無撞着性を確認した.

第 4 章では渦がある凝縮体について, 第 3 章で用いた手法を適用し, 相互作用定数が小さい極限における複素固有値出現条件を導出した. 得られた複素固有値出現条件は数値計算による先行研究 [22, 23] を再現する. また我々のグループによる 2 モード近似と RK の方法を用いた解析 [37] の結果も再現するとともに, 正ノルムと負ノルムの固有関数による 2 重縮退が複素固有値を引き起こしていることを明らかにすることで, その解析では明らかにされなかった 2 モード近似の有効性を示すことができた. さらに相互作用が弱い極限において, 複素固有値出現条件が軸方向のトラップポテンシャルの強さ ω_z に依存しないことを示した. 反対に相互作用が大きい場合においては, 複素固有値の出現条件が ω_z に強く依存するという数値計算の結果 [24] が報告されている.

第 5 章では光学格子中を流れる凝縮体について, 光学格子が弱い極限における複素固有値出現条件を導出した. ここでは複素固有値を引き起こす縮退を特定し, 考えているパラメータ領域で起こり得る全ての複素固有値を求めた. これは Wu 等による数値計算 [25, 26] の結果を再現する. また

Taylor 等 [31] による解析計算の結果も再現しているが, Taylor 等は Wu 等が指摘した縮退に関してのみ摂動計算を行っており, それ以外の部分から複素固有値が出現するかどうかを議論していない. さらに第 5 章で行った解析では摂動ポテンシャルが $\cos$ 型の光学格子ポテンシャルであることを本質的には使用しなかった. そのため, 加える周期ポテンシャルが $\cos$ 型のものでなくても, 同じ複素固有値出現条件が得られる. その意味で第 5 章の結果は Taylor 等の解析を含んだ, より広い一般化になっている.

本論文では簡単のため 1 成分 BEC に限って解析を行ってきた. その場合 BdG 方程式は 2 重項に対する固有値方程式となっていた. しかし第 3 章で行った定式化は本質的には BdG 方程式の持っている 2 つの対称性 $\sigma_1 T \sigma_1 = -T^*$ と $\sigma_3 T \sigma_3 = T^\dagger$ を使っているだけであり, BEC が 1 成分であるということは重要ではなかった. n 成分系に対する BdG 方程式は $2n$ 重項に対する方程式となるが, それでも上述の 2 つの対称性を持っている. そのため多成分系に対する BdG 方程式においても, 本論文で行った解析が有効であり, 正ノルムと負ノルムの縮退が複素固有値出現に必要であることが結論される. 本論文では簡単な例として, 凝縮体に渦がある場合, 凝縮体が光学格子中を流れる場合の具体的な複素固有値出現条件を求め, 不安定性の解析を行った. 今後, より複雑な例として多成分 BEC における複素固有値出現条件なども求めたい. また本研究は古典場の範囲を超えていない. 本研究で明らかにした複素固有値の出現の仕方を足掛かりにして, 場の量子論的記述を目指したい.

付録 A Bogoliubov–de Gennes の方法による非摂動ハミルトニアン の対角化

この付録では非摂動ハミルトニアンを対角化する方法の 1 つである BdG の方法について紹介する. この方法では場の演算子を BdG 方程式の完全系で展開することにより, 非摂動ハミルトニアンが対角化される. ゼロモードを考慮にした定式化は Lewenstein と You[45], Matsumoto と Sakamoto[46] によって, 複素モードを考慮に入れた定式化は Mine 等 [43] によって行われた.

A.1 複素固有値が存在しない場合

まず非摂動ハミルトニアン (2.20)

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = \int d^3x \left[\hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \left(K + V - \mu + 2g|\xi(\mathbf{x})|^2 \right) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \right. \\ \left. + \frac{1}{2}g \left(\xi^{*2}(\mathbf{x}) \hat{\varphi}^2(\mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) + \xi^2(\mathbf{x}) \hat{\varphi}^{\dagger 2}(\mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

を BdG 方程式に現れる T を使って書き表す. $\hat{\Phi}(\mathbf{x})$ を

$$\hat{\Phi}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \\ \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.2})$$

と定義すると, 非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ を

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \frac{1}{2} \int d^3x \hat{\Phi}^\dagger \begin{pmatrix} \mathcal{L} & \mathcal{M} \\ \mathcal{M}^* & \mathcal{L} \end{pmatrix} \hat{\Phi} \\ &= \frac{1}{2} \int d^3x \hat{\Phi}^\dagger \sigma_3 T \hat{\Phi} \\ &= \frac{1}{2} \left(\hat{\Phi}, T \hat{\Phi} \right),\end{aligned}\tag{A.3}$$

と書くことができる.

ここで $\hat{\Phi}(\mathbf{x})$ を BdG 方程式の完全系 (3.29) で展開する:

$$\hat{\Phi}(\mathbf{x}) = \sum_n \left\{ \hat{a}_n \mathbf{y}_n(\mathbf{x}) + \hat{a}_n^\dagger \mathbf{z}_n(\mathbf{x}) \right\} - i\hat{Q} \mathbf{y}_0 + \frac{\hat{P}}{I} \mathbf{y}_{-1}(\mathbf{x}).\tag{A.4}$$

ただし

$$\hat{a}_n = \left(\mathbf{y}_n, \hat{\Phi} \right), \quad \hat{a}_n^\dagger = - \left(\mathbf{z}_n, \hat{\Phi} \right),\tag{A.5}$$

$$\hat{Q} = i \left(\mathbf{y}_{-1}, \hat{\Phi} \right), \quad \hat{P} = I \left(\mathbf{y}_0, \hat{\Phi} \right),\tag{A.6}$$

とした. ここで $\mathbf{z}_n(\mathbf{x})$ の定義 (3.15) と $\hat{\Phi}(\mathbf{x})$ の定義 (A.2) より, $\hat{a}_n^\dagger$ が確かに $\hat{a}_n$ のエルミート共役であることが確認される. また $\mathbf{y}_0(\mathbf{x})$, $\mathbf{y}_{-1}(\mathbf{x})$ の定義 (3.20), (3.22) より, $\hat{P}$ と $\hat{Q}$ がともにエルミート演算子であることが示される. これらの演算子の交換関係を以下のように課す:

$$\left[\hat{Q}, \hat{P} \right] = i,\tag{A.7}$$

$$\left[\hat{a}_n, \hat{a}_m \right] = \delta_{nm}.\tag{A.8}$$

その他の同時刻交換関係は全て 0 である.

さて $\hat{\varphi}(\mathbf{x})$ に課されている正準交換関係 (2.16), (2.17) は $\hat{\Phi}(\mathbf{x})$ を用いて

$$\hat{\Phi}(\mathbf{x}) \hat{\Phi}^\dagger(\mathbf{x}') - \left(\hat{\Phi}^{\dagger t}(\mathbf{x}) \hat{\Phi}^t(\mathbf{x}') \right)^t = \sigma_3 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'),\tag{A.9}$$

と書くことができる. この式に $\hat{\Phi}(\mathbf{x})$ の展開 (A.4) を代入し, 展開係数に課した交換関係 (A.5), (A.6) を用いて整理すると,

$$\sum_n \left\{ \mathbf{y}_n(\mathbf{x}) \mathbf{y}_n^\dagger(\mathbf{x}') - \mathbf{z}_n(\mathbf{x}) \mathbf{z}_n^\dagger(\mathbf{x}') \right\} + \mathbf{y}_0(\mathbf{x}) \mathbf{y}_{-1}^\dagger(\mathbf{x}') + \mathbf{y}_{-1}(\mathbf{x}) \mathbf{y}_0^\dagger(\mathbf{x}') = \sigma_3 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'),\tag{A.10}$$

を得る. これはまさしく BdG 方程式における固有関数の完全性条件 (3.29) である. これより展開係数に課すべき交換関係が (A.5)–(A.6) であることが確認された.

このように準備した $\hat{\Phi}(\mathbf{x})$ を (A.3) に代入することで非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ を

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_0 &= \frac{1}{2} \hat{Q}^2(\mathbf{y}_0, T\mathbf{y}_0) + \frac{\hat{P}^2}{2I^2}(\mathbf{y}_{-1}, T\mathbf{y}_{-1}) + i \frac{\hat{Q}\hat{P}}{2I}(\mathbf{y}_0, T\mathbf{y}_{-1}) - i \frac{\hat{P}\hat{Q}}{2I}(\mathbf{y}_{-1}, T\mathbf{y}_0) \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_n \left\{ i \hat{Q} \hat{a}_n(\mathbf{y}_0, T\mathbf{y}_n) + i \hat{Q} \hat{a}_n^\dagger(\mathbf{y}_0, T\mathbf{z}_n) \right. \\
 &\quad \quad \left. + \frac{\hat{P}}{I} \hat{a}_n(\mathbf{y}_{-1}, T\mathbf{y}_n) + \frac{\hat{P}}{I} \hat{a}_n^\dagger(\mathbf{y}_{-1}, T\mathbf{z}_n) \right\} \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_m \left\{ -i \hat{a}_m^\dagger \hat{Q}(\mathbf{y}_m, T\mathbf{y}_0) - i \hat{a}_m \hat{Q}(\mathbf{z}_m, T\mathbf{y}_0) \right. \\
 &\quad \quad \left. + \hat{a}_m^\dagger \frac{\hat{P}}{I}(\mathbf{y}_m, T\mathbf{y}_{-1}) + \hat{a}_m \frac{\hat{P}}{I}(\mathbf{z}_m, T\mathbf{y}_{-1}) \right\} \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{nm} \left\{ \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n(\mathbf{y}_m, T\mathbf{y}_n) + \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n^\dagger(\mathbf{y}_m, T\mathbf{z}_n) \right. \\
 &\quad \quad \left. + \hat{a}_m \hat{a}_n(\mathbf{z}_m, T\mathbf{y}_n) + \hat{a}_m \hat{a}_n^\dagger(\mathbf{z}_m, T\mathbf{z}_n) \right\} \\
 &= \sum_n E_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n + \frac{\hat{P}^2}{2I} + (\text{c 数}), \tag{A.11}
 \end{aligned}$$

と対角化することができる。ゼロモードは量子座標として非摂動ハミルトニアンに現れている。またこのように非摂動ハミルトニアンを対角化して初めて、BdG 方程式の固有値 E_n を準粒子のエネルギーと解釈することができる。ここで E_n は $\mathbf{y}_n(\mathbf{x})$ が属する固有値である。一方 $\mathbf{z}_n(\mathbf{x})$ が属する固有値である $-E_n$ は非摂動ハミルトニアンには直接は現れない。

A.2 複素固有値が存在する場合

ここまでの議論を BdG 方程式に複素固有値が存在する場合に拡張する。完全性条件が (3.41) に変化し、場の展開は

$$\begin{aligned}
 \hat{\Phi}(\mathbf{x}) &= \sum_n \left\{ \hat{a}_n \mathbf{y}_n(\mathbf{x}) + \hat{a}_n^\dagger \mathbf{z}_n(\mathbf{x}) \right\} - i \hat{Q} \mathbf{y}_0(\mathbf{x}) + \frac{\hat{P}}{I} \mathbf{y}_{-1}(\mathbf{x}) \\
 &\quad + \sum_\mu \left\{ \hat{A}_\mu \mathbf{y}_\mu(\mathbf{x}) + \hat{B}_\mu \mathbf{y}_{*\mu}(\mathbf{x}) + \hat{A}_\mu^\dagger \mathbf{z}_\mu(\mathbf{x}) + \hat{B}_\mu^\dagger \mathbf{z}_{*\mu}(\mathbf{x}) \right\}, \tag{A.12}
 \end{aligned}$$

となる。ここで

$$\hat{A}_\mu = (\mathbf{y}_{*\mu}, \hat{\Phi}), \quad \hat{A}_\mu^\dagger = -(\mathbf{z}_{*\mu}, \hat{\Phi}), \tag{A.13}$$

$$\hat{B}_\mu = (\mathbf{y}_\mu, \hat{\Phi}), \quad \hat{B}_\mu^\dagger = -(\mathbf{z}_\mu, \hat{\Phi}), \tag{A.14}$$

であり、 $\hat{\varphi}(\mathbf{x})$ の正準交換関係を守るために、これらには交換関係

$$[\hat{A}_\mu, \hat{B}_\nu^\dagger] = \delta_{\mu\nu}, \quad [\hat{A}_\mu, \hat{A}_\nu^\dagger] = 0, \tag{A.15}$$

$$[\hat{A}_\mu, \hat{B}_\nu] = 0, \quad [\hat{B}_\mu, \hat{B}_\nu^\dagger] = 0, \tag{A.16}$$

が課されている. ここで $\hat{A}_\mu$ や $\hat{B}_\mu$ はボソン型の生成消滅演算子の交換関係を満たしていないことに注意する. また $\hat{A}_\mu$ と $\hat{B}_\mu$ のエルミート共役は確かにそれぞれ $\hat{A}_\mu^\dagger$ と $\hat{B}_\mu^\dagger$ になっている. このように展開した $\hat{\Phi}(\mathbf{x})$ を (A.3) に代入すると,

$$\hat{H}_0 = \sum_n E_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n + \frac{\hat{P}^2}{2I} + \sum_\mu \left(E_\mu^* \hat{A}_\mu^\dagger \hat{B}_\mu + E_\mu \hat{B}_\mu^\dagger \hat{A}_\mu \right) + (\text{c 数}), \quad (\text{A.17})$$

と“対角化”される.

非摂動ハミルトニアンに対角化可能性を調べるために, その複素モード部分を $\hat{H}_0^{(c)}$ と書く:

$$\hat{H}_0^{(c)} = \sum_\mu \left(E_\mu^* \hat{A}_\mu^\dagger \hat{B}_\mu + E_\mu \hat{B}_\mu^\dagger \hat{A}_\mu \right). \quad (\text{A.18})$$

ここでボソン型の生成消滅演算子の交換関係を満たす演算子 $\hat{a}_\mu, \tilde{a}_\mu$ を

$$\hat{a}_\mu = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{A}_\mu + \hat{B}_\mu \right), \quad (\text{A.19})$$

$$\tilde{a}_\mu = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\hat{A}_\mu^\dagger - \hat{B}_\mu^\dagger \right), \quad (\text{A.20})$$

と導入する. $\hat{a}_\mu, \tilde{a}_\mu$ を使って $\hat{H}_0^{(c)}$ は

$$\hat{H}_0^{(c)} = \sum_\mu \left[\text{Re}(E_\mu) \left(\hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\mu - \tilde{a}_\mu^\dagger \tilde{a}_\mu \right) - \text{Im}(E_\mu) \left(\hat{a}_\mu \tilde{a}_\mu^\dagger + \tilde{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\mu \right) \right], \quad (\text{A.21})$$

と表される. さらに以下の様な Bogoliubov 変換で対角化を試みる:

$$\hat{a}_\mu = c_\mu \hat{\xi}_\mu - s_\mu \tilde{\xi}_\mu^\dagger, \quad (\text{A.22})$$

$$\tilde{a}_\mu^\dagger = -s_\mu \hat{\xi}_\mu + c_\mu \tilde{\xi}_\mu^\dagger. \quad (\text{A.23})$$

ただし $c_\mu^2 - s_\mu^2 = 1$ であり, $\hat{\xi}_\mu$ と $\tilde{\xi}_\mu$ はボソン型の生成消滅演算子の生成消滅演算子の代数を満たす. すると $\hat{H}_0^{(c)}$ は

$$\begin{aligned} \hat{H}_0^{(c)} = \sum_\mu \left[\left\{ \text{Re}(E_\mu) - 2c_\mu s_\mu \text{Im}(E_\mu) \right\} \hat{\xi}_\mu^\dagger \hat{\xi}_\mu - \left\{ \text{Re}(E_\mu) + 2c_\mu s_\mu \text{Im}(E_\mu) \right\} \tilde{\xi}_\mu^\dagger \tilde{\xi}_\mu \right. \\ \left. - \text{Im}(E_\mu)(c_\mu^2 + s_\mu^2) \left(\hat{\xi}_\mu \tilde{\xi}_\mu^\dagger + \tilde{\xi}_\mu^\dagger \hat{\xi}_\mu \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

となる. しかし E_μ は複素固有値なので $\text{Im} E_\mu \neq 0$ であり, $c_\mu^2 + s_\mu^2 = 0$ となることも不可能である. 従って $\hat{H}_0^{(c)}$ はボソン型の生成消滅演算子で対角化できないことが示された. このように複素固有値が出現する場合は非摂動ハミルトニアンは通常の意味での対角化されず, ハミルトニアンの複素モード部分を“対角化”する演算子はボソン型の生成消滅演算子の代数に従わない. そのため複素固有値は準粒子のエネルギーと解釈することはできない. またこの場合通常の Fock 表現が取れず, 状態の決め方は自明ではない [43, 44].

付録 B Rossignori–Kowalski の方法による非摂動ハミルトニアンの対角化

この付録では非摂動ハミルトニアンを対角化する方法の 1 つである RK の方法 [35] について紹介する. RK の方法をによっても BdG の方法と同様, 動的不安定性を示す複素モードを含めた「対角化」を行うことができる. BdG の方法とは異なり, RK の方法ではゼロモードを考慮に入れた定式化はされていないが, その点を除けば, 2 つの方法が同等であることが示されている [36].

B.1 Rossignori–Kowalski の方法

RK の方法では, 生成消滅演算子による 2 次形式のハミルトニアンを考える. そこでまず場の演算子を適当な正規完全直交系 $\{w_i(\mathbf{x})\}$ を用いて

$$\hat{\varphi}(\mathbf{x}) = \sum_i \hat{b}_i w_i(\mathbf{x}), \quad (\text{B.1})$$

と展開し, 非摂動ハミルトニアン (2.20) をボソン型の生成消滅演算子の交換関係を満たす演算子 $\hat{b}_i$ を用いて書き表す:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{b}^\dagger & \hat{b} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b} \\ \hat{b}^\dagger \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} Z^\dagger \mathcal{H} Z. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

ただし

$$A_{ij} = \int d^3x w_i^*(\mathbf{x}) \mathcal{L} w_j(\mathbf{x}), \quad (\text{B.3})$$

$$B_{ij} = \int d^3x w_i^*(\mathbf{x}) \mathcal{M} w_j^*(\mathbf{x}), \quad (\text{B.4})$$

であり

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^t \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} \hat{b} \\ \hat{b}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (\text{B.5})$$

$$\hat{b} = \begin{pmatrix} \hat{b}_1 \\ \hat{b}_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \hat{b}^\dagger = \begin{pmatrix} \hat{b}_1^\dagger \\ \hat{b}_2^\dagger \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (\text{B.6})$$

とした. $\hat{H}_0$ のエルミート性を受けて A はエルミート行列, B は対称行列になる. また $\hat{b}_i$ に課される交換関係を Z で書き換えると

$$ZZ^\dagger - \left(Z^{\dagger t} Z^t\right)^t = S_3, \quad (\text{B.7})$$

となる. ただし

$$S_3 = \begin{pmatrix} I & O \\ O & -I \end{pmatrix}, \quad (\text{B.8})$$

である.

続いて Z に関する線形変換

$$Z = \mathcal{W}Z', \quad Z' = \begin{pmatrix} \hat{b}' \\ \bar{b}' \end{pmatrix}, \quad (\text{B.9})$$

を考える. ただし

$$\hat{b}' = \begin{pmatrix} \hat{b}'_1 \\ \hat{b}'_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \bar{b}' = \begin{pmatrix} \bar{b}'_1 \\ \bar{b}'_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (\text{B.10})$$

である. ここで $\bar{b}'_i$ は $\hat{b}'_i$ のエルミート共役である必要はないが, 以下の交換関係は満足するものとする:

$$Z' \bar{Z}'^\dagger - (\bar{Z}'^\dagger Z')^t = S_3. \quad (\text{B.11})$$

ただし

$$\bar{Z}' = \begin{pmatrix} \bar{b}' & \hat{b}' \end{pmatrix} = Z'^t S_1, \quad S_1 = \begin{pmatrix} O & I \\ I & O \end{pmatrix}, \quad (\text{B.12})$$

である.

次に $Z^\dagger = \bar{Z}' \bar{\mathcal{W}}$ となるように $\bar{\mathcal{W}}$ を定義したい. これは $Z'^t = (\bar{Z}' \bar{\mathcal{W}})^t = \bar{\mathcal{W}}^t S_1 Z'$ であることと $Z'^t = S_1 Z = S_1 \mathcal{W} Z'$ であることを利用すれば

$$\bar{\mathcal{W}} = S_1 \mathcal{W}^t S_1, \quad (\text{B.13})$$

とすれば良いことが直ちに分かる. 交換関係 (B.11) の要請のために, 変換 $\mathcal{W}$ は等式

$$\mathcal{W} S_3 \bar{\mathcal{W}} = S_3, \quad (\text{B.14})$$

を満たさなくてはならない. 特に $\mathcal{W}$ が正則であるならば

$$\bar{\mathcal{W}} = S_3 \mathcal{W}^{-1} S_3, \quad (\text{B.15})$$

が成り立つ.

以上の準備のもとに非摂動ハミルトニアンを対角化する. まず以下では $\mathcal{W}$ の正則性を仮定し, $\hat{H}_0$ を

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \bar{Z}' \mathcal{H}' Z', \quad (\text{B.16})$$

と書き換える. ただし

$$\mathcal{H}' = \bar{\mathcal{W}} \mathcal{H} \mathcal{W}, \quad (\text{B.17})$$

である. ここで $\mathcal{H}'$ を対角行列にするような $\mathcal{W}$ を見つけたい. そのため (B.15) を使い (B.17) を

$$S_3 \mathcal{H}' = \mathcal{W}^{-1} S_3 \mathcal{H} \mathcal{W}, \quad (\text{B.18})$$

と書き換える. このようにして非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ の対角化は

$$\tilde{\mathcal{H}} = S_3 \mathcal{H} = \begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^t \end{pmatrix}, \quad (\text{B.19})$$

に対する対角化問題に帰着された. $\tilde{\mathcal{H}}$ はエルミート行列ではないため, 複素数固有値を持つことができる. $\tilde{\mathcal{H}}$ が持っている BdG 方程式と同様の対称性

$$S_1 \tilde{\mathcal{H}} S_1 = -\tilde{\mathcal{H}}^*, \quad (\text{B.20})$$

より, $E^{(\text{RK})}$ が $\tilde{\mathcal{H}}$ の固有値ならば $-E^{(\text{RK})*}$ もまた固有値であることが分かる. 非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ は $\tilde{\mathcal{H}}$ の固有値 $E_i^{(\text{RK})}$, $-E_i^{(\text{RK})*}$ を使って,

$$\hat{H}_0 = \sum_i E_i^{(\text{RK})} \bar{b}_i \hat{b}_i' + (\text{c 数}), \quad (\text{B.21})$$

と「対角化」することができる. $E_i^{(\text{RK})}$ が実固有値の場合は $\bar{b}_i = \hat{b}_i^\dagger$ であるが, $E_i^{(\text{RK})}$ が複素固有値の場合は $\bar{b}_i \neq \hat{b}_i^\dagger$ であり, 通常の意味では対角化されない. また $\hat{b}_i$, $\bar{b}_i$ の時間発展は

$$\hat{b}_i = \hat{b}_i e^{-iE_i^{(\text{RK})}t/\hbar}, \quad (\text{B.22})$$

$$\bar{b}_i = \hat{b}_i e^{iE_i^{(\text{RK})}t/\hbar}, \quad (\text{B.23})$$

であり, 複素固有値が存在する場合, 指数関数的に増減する振る舞いを示す. つまり $\tilde{\mathcal{H}}$ における複素固有値の存在は, 系の動的不安定性を表している.

B.2 Bogoliubov–de Gennes の方法との同等性

BdG 方程式 (2.27) の固有関数 $\begin{pmatrix} u(\mathbf{x}) \\ v(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$ を, RK の方法で用いた正規完全直交系 $\{w_i(\mathbf{x})\}$ で

$$u(\mathbf{x}) = \sum_i U_i w_i(\mathbf{x}), \quad (\text{B.24})$$

$$v(\mathbf{x}) = \sum_i V_i w_i^*(\mathbf{x}), \quad (\text{B.25})$$

と展開する. すると BdG 方程式は

$$\sum_j \left(U_j \mathcal{L} w_j(\mathbf{x}) + V_j \mathcal{M} w_j^*(\mathbf{x}) \right) = E \sum_j U_j w_j(\mathbf{x}), \quad (\text{B.26})$$

$$-\sum_j \left(U_j \mathcal{M}^* w_j(\mathbf{x}) + V_j \mathcal{L} w_j^*(\mathbf{x}) \right) = E \sum_j V_j w_j^*(\mathbf{x}), \quad (\text{B.27})$$

となる. それぞれ左から $w_i^*(\mathbf{x})$, $w_i(\mathbf{x})$ を掛けて全空間で積分し

$$\sum_j \left(A_{ij} U_j + B_{ij} V_j \right) = E U_i, \quad (\text{B.28})$$

$$-\sum_j \left(B_{ij}^* U_j + A_{ji} V_j \right) = E V_j, \quad (\text{B.29})$$

を得る. ただし A, B は (B.3), (B.4) で定義されたものである. ここで U と V を

$$U = \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (\text{B.30})$$

と定義すると

$$\begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix}, \quad (\text{B.31})$$

となる. これは RK の方法における $\tilde{\mathcal{H}}$ の固有値問題に他ならない. 以上をもって RK の方法と BdG の方法が同等であることが示された. BdG 方程式の固有値 E は RK の方法の固有値 $E^{(\text{RK})}$ に完全に一致する. また, $\tilde{\mathcal{H}}$ の固有ベクトルと BdG 方程式の固有関数は (B.24), (B.25) によって結ばれている. ただし RK の方法ではゼロモードを考慮に入れた議論を行っていない. ここで示されたのはあくまで2つの方法における, ゼロモードを除いた同等性である.

謝辞

本研究を進めるにあたり, 熱心にご指導してくださいました山中由也教授に感謝いたします. また山中先生とともに奥村雅彦博士, 峰真如博士, 小林恵太氏には普段のゼミなど様々な場面において, 沢山の有意義な議論と助言を頂きました. 井上智喜氏とは BEC に関する実りある議論をさせていただきました. また久野文代氏, 杉本健太氏, 水村崇人氏, 山田幸宏氏, 須藤啓太氏, 竹内佑樹氏, 武智壮平氏, 田中裕一郎氏, 堤康祐氏, 山田晋大氏, 和田梢氏には卒業研究を通して有意義な議論をさせて頂きました. これらの議論により様々な分野への知見を広げることができました. この場を借りてお礼申し上げます.

参考文献

- [1] A. Einstein, Sitzber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss. 261 (1924); Sitzber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss. 3 (1925).
- [2] F. London, Nature (London) **141**, 643 (1938).
- [3] J. L. Lin and J. P. Wolfe, Phys. Rev. Lett. **71**, 1222 (1993).
- [4] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Science **269**, 198 (1995).
- [5] K. B. Davis, M. -O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
- [6] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).

- [7] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hansch, and I. Bloch, *Nature (London)* **415**, 39 (2002).
- [8] M. B. Dahan, E. Peik, J. Reichel, Y. Castin, and C. Salomon, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4511 (1996).
- [9] M. R. Matthews, B. P. Anderson, P. C. Haljan, D. S. Hall, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2498 (1999).
- [10] K. W. Madison, F. Chevy, W. Wohlleben, and J. Dalibard, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 806 (2000).
- [11] E. Hodby, G. Hechenblaikner, S. A. Hopkins, O. M. Margao, and C. J. Foot, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 010405 (2002).
- [12] P. C. Haljan, I. Coddington, P. Engels, and E. A. Coenell, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 210403 (2001).
- [13] A. E. Leanhardt, A. Görlitz, A. P. Chikkatur, D. Kielpinski, Y. Shin, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 190403 (2002).
- [14] Y. Shin, M. Saba, M. Vengalattore, T. A. Pasquini, C. Sanner, A. E. Leanhardt, M. Prentiss, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 160406 (2004).
- [15] L. Pitaevskii, and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, (Oxford University Press, New York, 2003).
- [16] L. Fallani, L. De Sarlo, J. E. Lye, M. Modugno, R. Saers, C. Fort, and M. Inguscio, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 140406 (2004).
- [17] L. E. Sadler, J. M. Higbie, S. R. Leslie, M. Vengalattore, and D. M. Stamper-Kurn, *Nature* **443**, 312 (2006).
- [18] N. N. Bogoliubov, *J. Phys. (Moscow)* **11**, 23 (1947).
- [19] P. G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys* (Benjamin, New York, 1966).
- [20] A. L. Fetter, *Ann. of Phys.* **70**, 67 (1972).
- [21] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463 (1999).
- [22] H. Pu, C. K. Law, J. H. Eberly, and N. P. Bigelow, *Phys. Rev. A* **59**, 1533 (1999).
- [23] Y. Kawaguchi and T. Ohmi, *Phys. Rev. A* **70**, 043610 (2004).
- [24] E. Lundh and H. M. Nilsen, *Phys. Rev. A* **74**, 063620 (2006).
- [25] B. Wu and Q. Niu, *Phys. Rev. A* **64**, 061603(R) (2001).
- [26] B. Wu and Q. Niu, *New J. Phys.* **5**, 104 (2003).
- [27] K. M. Hilligsøe, M. K. Oberthaler, and K. -P. Marzlin, *Phys. Rev. A* **66**, 063605 (2002).

- [28] W. Zhang, D. L. Zhou, M. -S. Chang, M. S. Chapman, and L. You, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 180403 (2005).
- [29] D. C. Roberts and M. Ueda, *Phys. Rev. A* **73**, 053611 (2006).
- [30] S. Hooley and K. A. Benedict, *Phys. Rev. A* **75**, 033621 (2007).
- [31] E. Taylor and E. Zaremba, *Phys. Rev. A* **68**, 053611 (2003).
- [32] D. V. Skryabin, *Phys. Rev. A* **63**, 013602 (2000).
- [33] J. A. Huhtamäki, M. Möttönen, T. Isoshima, V. Pietilä, and S. M. M. Virtanen, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 110406 (2006).
- [34] A. Muñoz and V. Delgado, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 180409 (2006).
- [35] R. Rossignoli and A. M. Kowalski, *Phys. Rev. A* **72**, 032101 (2005).
- [36] 峰真如, 奥村雅彦, 山中由也, 日本物理学会 2007 年春季大会, 18aXJ-10 (2007).
- [37] E. Fukuyama, M. Mine, M. Okumura, T. Sunaga, and Y. Yamanaka, *Phys. Rev. A* **76**, 043608 (2007).
- [38] E. P. Gross, *Nuovo Cimento* **20**, 454 (1961); *J. Math. Phys.* **4**, 195 (1963).
L. P. Pitaevskii, *Zh. Eksp. Teor. Fiz. [Soc. Phys. JETP]* **40**, 546 (1961); *Sov. Phys. JETP* **13**, 451 (1961).
- [39] 並木美喜雄, 大場一郎, 散乱の量子力学 (岩波書店, 1997).
- [40] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H. -J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Science* **275**, 637 (1997).
- [41] A. Röhrl, M. Narashewski, A. Schenzle, and H. Wallis, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4143 (1997).
- [42] D. S. Hall, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and H. A. Cornrll, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1543 (1998).
- [43] M. Mine, M. Okumura, T. Sunaga, and Y. Yamanaka, *Ann. Phys. (N.Y.)* **322**, 2327 (2007).
- [44] K. Kobayashi, M. Mine, M. Okumura, and Y. Yamanaka, *Ann. Phys. (N.Y.)* **323**, 1247 (2008).
- [45] M. Lewenstein and L. You, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3489 (1996).
- [46] H. Matsumoto and S. Sakamoto, *Prog. Theor. Phys.* **107**, 679 (2002).