

一次元光学格子中の冷却気体Bose-Einstein凝縮系 における量子輸送方程式による数値シミュレーション

基研研究会「熱場の量子論とその応用」
2013/8/27

早稲田大学 基幹理工学部
桑原 幸朗、中村祐介、山中由也

発表の流れ

- 研究目的
- 冷却中性Bose気体系
- Thermo Field Dynamics (TFD)
- Bose-Einstein凝縮体が存在する場合の非平衡TFD
- まとめと今後の課題

研究目的

冷却中性Bose気体系への非平衡Thermo Field Dynamics (TFD) の応用

これまでの研究で冷却中性Bose気体系に対し、
非平衡TFDからnon-Markov型の量子輸送方程式が導出されている。

Y. Nakamura, T. Sunaga, M. Mine, M. Okumura, Y. Yamanaka, Ann. Phys. (N.Y.) **325**, 426 (2010).

Y. Nakamura and Y. Yamanaka, Ann. Phys. (N.Y.) **326**, 1070 (2011).

外場が時間依存する系に対する非平衡過程の解析は十分に行われていなかった。



前回の発表

熱場の量子論とその応用2012

外場が時間依存するモデルとして、調和振動子と光学格子を結合したポテンシャル中に
捕捉された冷却中性Bose気体を考えた。

気体の緩和過程を非平衡TFDから導出された量子輸送方程式を用いて数値解析した。
ただし、Bose-Einstein凝縮していない場合を考えていた。



今回の発表

前回のモデルをBose-Einstein凝縮している場合へ拡張！

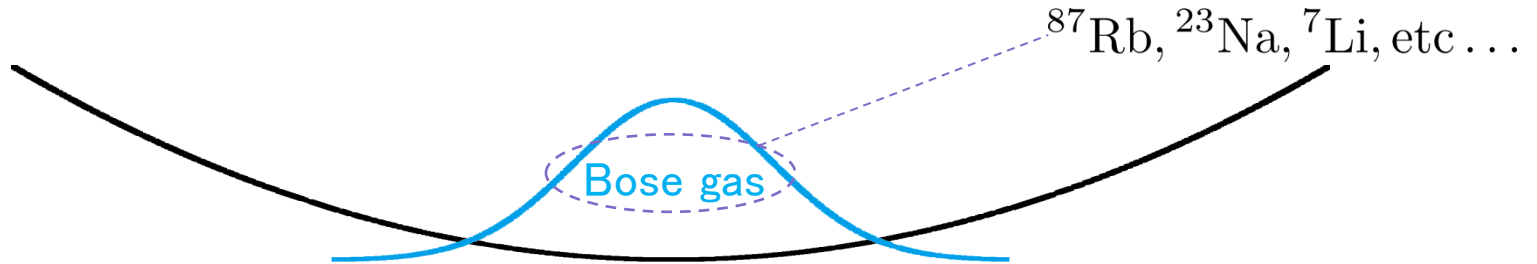
発表の流れ

- 研究目的
- 冷却中性Bose気体系
- Thermo Field Dynamics (TFD)
- Bose-Einstein凝縮体が存在する場合の非平衡TFD
- まとめと今後の課題

冷却中性Bose気体系

冷却中性Bose気体系

↳ 磁気・光学トラップでBose気体を捕捉し、極低温まで冷却した系



特徴

極低温(nK ~ μ K)まで冷却可能

希薄($10^{13} \sim 10^{15} \text{cm}^{-3}$)な気体系

相互作用が弱い

高い実験制御性

↳ { トラップの強さ・形状
その他実験パラメータ

↳ 転移温度以下でBose-Einstein凝縮

熱緩和がゆっくり

理論検証に好都合

非平衡系の理論に対する検証の場として優れている

Thermo Field Dynamics

Thermo Field Dynamics (TFD)

↳ 熱場の量子論に対する実時間正準形式の定式化

物理量の熱平均

↳ 通常は混合状態期待値 $\langle A \rangle = \text{Tr}[A\rho]$ [ρ : 密度行列]

TFDでは自由度を倍加

$$a_\ell \Rightarrow a_\ell, \tilde{a}_\ell$$



純粋状態期待値で表せる $\langle A \rangle = \langle 0|A|0 \rangle$ [$\langle 0|, |0 \rangle$: 熱的真空]

さらに非平衡系では(非平衡TFD)

時間依存する分布関数 $n_\ell(t) \equiv \langle 0|a_\ell^\dagger(t)a_\ell(t)|0 \rangle$ を未知パラメータとして導入

↳ 自己無撞着な繰り込み条件を課すことで $\dot{n}_\ell(t)$ を決める

↳ **量子輸送方程式**

発表の流れ

- 研究目的
- 冷却中性Bose気体系
- Thermo Field Dynamics (TFD)
- Bose-Einstein凝縮体が存在する場合の非平衡TFD
 - 計算モデル
 - ハミルトニアン
 - 繰り込み条件
- まとめと今後の課題

今回扱う計算モデルのもとで説明

Y. Nakamura and Y. Yamanaka, Ann. Phys. (N.Y.) **326**, 1070 (2011).

計算モデル

一次元調和振動子ポテンシャルと光学格子ポテンシャルを
組み合わせたポテンシャルに冷却原子を捕捉

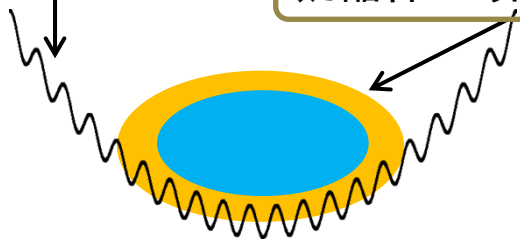
※今回はBose-Einstein凝縮している場合を扱う

1. $t < 0$ で平衡状態を用意
2. $t = 0$ で調和振動子ポテンシャルを瞬間的にずらす \longrightarrow 非平衡状態へ
3. $t > 0$ の非平衡過程を解析

調和振動子 & 光学格子

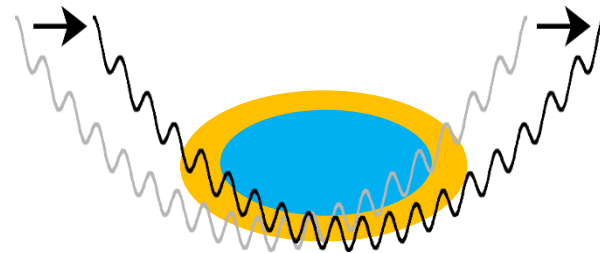
粒子のやりとりを想定

凝縮体 & 非凝縮気体



$t < 0$ 平衡

$t = 0$



$t > 0$ 非平衡

ハミルトニアンの記事

ハミルトニアン

冷却中性Bose気体系のハミルトニアン

$$H(t) = \int dx \left[\Psi^\dagger(x, t) \left(-\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\text{opt}}(x) + V_{\text{har}}(x, t) - \mu \right) \Psi(x, t) + \frac{g}{2} \Psi^\dagger(x, t) \Psi^\dagger(x, t) \Psi(x, t) \Psi(x, t) \right]$$

光学格子ポテンシャル

調和振動子ポテンシャル [※ $t=0$ で変化]



Wannier関数で展開 & 強結合近似

$$\Psi(x, t) = \sum_i \psi_i(t) w_i(x)$$

[i : サイトラベル]

Bose-Hubbardハミルトニアン

D. Jaksh et al., Phys. Rev. Lett. **81**, 3108 (1998).

$$H(t) = \sum_i \left[-J \psi_i^\dagger(t) (\psi_{i+1}(t) + \psi_{i-1}(t)) + \{ \nu_i(t) - \mu \} \psi_i^\dagger(t) \psi_i(t) + \frac{U}{2} \psi_i^\dagger(t) \psi_i^\dagger(t) \psi_i(t) \psi_i(t) \right]$$

サイト間の移動

※隣接サイトへの移動のみ考慮

調和ポテンシャルの効果

粒子間相互作用

※オンサイトのみ考慮

$$J = - \int dx w_i^*(x) \left(-\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\text{opt}}(x) \right) w_{i+1}(x)$$

$$\nu_i(t) = \int dx V_{\text{har}}(x, t) |w_i(x)|^2$$

$$U = g \int dx |w_i(x)|^4$$

凝縮系の記述

凝縮系の記述

$$H(t) = \sum_i \left[-J\psi_i^\dagger(t)(\psi_{i+1}(t) + \psi_{i-1}(t)) + \{\nu_i(t) - \mu\}\psi_i^\dagger(t)\psi_i(t) + \frac{U}{2}\psi_i^\dagger(t)\psi_i^\dagger(t)\psi_i(t)\psi_i(t) \right]$$

場の分割 $\zeta_i(t)$: 凝縮相
 $\psi_i(t) = \zeta_i(t) + \varphi_i(t)$ $\varphi_i(t)$: 非凝縮相

$$T_{0,ij}^{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} \mathcal{L}_{0,ij} & \mathcal{M}_{0,ij} \\ -\mathcal{M}_{0,ij}^* & -\mathcal{L}_{0,ij} \end{pmatrix}^{\alpha\beta}$$

$$\varphi_i^\alpha = \begin{pmatrix} \varphi_i \\ \varphi_i^\dagger \end{pmatrix}^\alpha \quad \bar{\varphi}_i^\beta = \begin{pmatrix} \varphi_i^\dagger & -\varphi_i \end{pmatrix}^\beta$$

$$\mathcal{L}_{0,ij} = -J(\delta_{i,j+1} + \delta_{i,j-1}) + \delta_{ij}(\nu_i - \mu + 2U|\zeta_i|^2)$$

$$\mathcal{M}_{0,ij} = U\delta_{ij}\zeta_i^2$$

$$h_{0,ij} = -J(\delta_{i,j+1} + \delta_{i,j-1}) + \delta_{ij}(\nu_i - \mu + U|\zeta_i|^2)$$

φ の1次と2次の項を非摂動ハミルトニアン H_0 にとる

$$H_0 = \sum_{ij} \left[\frac{1}{2}\bar{\varphi}_i^\alpha \left(T_{0,ij}^{\alpha\beta} + \delta T_{ij}^{\alpha\beta} \right) \varphi_j^\beta + \varphi_i^\dagger (h_{0,ij}\zeta_j + \delta_{ij}\delta C_i) + \varphi_i (h_{0,ij}\zeta_j^* + \delta_{ij}\delta C_i^*) \right]$$

カウンター項 \Rightarrow 自己無撞着に決める

時間依存する凝縮相 $\zeta_i(t)$ を扱う

H. Matsumoto and S. Sakamoto, Prog. Theor. Phys. **105**, 573, (2001).

φ_i を時間依存Bogoliubov-de Gennes (TDBdG)方程式に従う正規直交完全系 $\{W_{il}(t)\}$ で展開

$$i\dot{W}_{il}(t) = \sum_{ij} [T_{0,ij}(t) + \delta T_{ij}(t)] W_{j\ell}(t) \quad \varphi_i^\alpha(t) = \sum_\ell W_{i\ell}^{\alpha\beta}(t)b_\ell^\beta \quad \left[W_{il}(t): 2 \times 2 \text{行列} \right]$$

場の分割条件 $\langle 0|\varphi_i(t)|0\rangle = 0 \Rightarrow \delta C_i = i\dot{\zeta}_i - \sum_{ij} h_{0,ij}\zeta_j$
 $\left[\zeta_i(t) \text{の時間発展方程式は後で導出} \right]$

非平衡TFDの適用 \gggg

非平衡TFDの適用

自由度の倍加

$$\varphi_i^\alpha \longrightarrow \varphi_i^{\mu\alpha} = \begin{pmatrix} \varphi_i^{11} \\ \varphi_i^{21} \\ \varphi_i^{12} \\ \varphi_i^{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_i \\ \tilde{\varphi}_i^\dagger \\ \varphi_i \\ \tilde{\varphi}_i \end{pmatrix}^{\mu\alpha} \quad \bar{\varphi}_i^\beta \longrightarrow \bar{\varphi}_i^{\nu\beta} = \begin{pmatrix} \bar{\varphi}_i^{11} & \bar{\varphi}_i^{21} & \bar{\varphi}_i^{12} & \bar{\varphi}_i^{22} \\ \varphi_i^\dagger & -\tilde{\varphi}_i & -\varphi_i & \tilde{\varphi}_i^\dagger \end{pmatrix}^{\nu\beta}$$

$\mu, \nu \longrightarrow$ 熱的二重項
 $\alpha, \beta \longrightarrow$ BdGの二重項

四重項

伝搬関数や自己エネルギーは4×4の行列構造

繰り込み条件を課すことで \dot{n}_ℓ や $\delta T_{ij}^{\alpha\beta}$ を決める

$$\left[n_\ell = \langle 0 | b_\ell^\dagger b_\ell | 0 \rangle \right]$$

通常の場合の量子論 \longrightarrow 繰り込み条件をon-shell自己エネルギーに課す

非平衡系だとon-shell自己エネルギーの定義は非自明

On-shell自己エネルギー

Y. Nakamura, Y. Yamanaka, Ann. Phys. (N.Y.), **331**, 51 (2013).

$$S_{l_1 l_2}^{\mu\alpha\nu\beta}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \left[\theta(\tau) S_{l_1 l_2}^{\mu\alpha\nu\beta}(t, t - \tau) + \theta(-\tau) S_{l_1 l_2}^{\mu\alpha\nu\beta}(t + \tau, t) \right]$$

非対角成分の繰り込みも可能

t より未来の情報が入っていない(因果律)

$[S_{l_1 l_2}^{\mu\alpha\nu\beta}(t_1, t_2)]$: 自己エネルギー

平衡系なら相対時間についてのFourier変換

繰り込み条件

どのような繰り込み条件を課すべきか？

$S_{l_1 l_2}^{\mu\alpha\nu\beta}(t)$ の具体形

$$\begin{aligned} S_{l_1 l_2}^{1111}(t) &= S_{\text{loop}, l_1 l_2}^{1111}(t) - ((\mathbf{y}_{l_1}, \delta T \mathbf{y}_{l_2}))_t \\ S_{l_1 l_2}^{1122}(t) &= S_{\text{loop}, l_1 l_2}^{1122}(t) - ((\mathbf{y}_{l_1}, \delta T \mathbf{z}_{l_2}))_t \\ S_{ll}^{1121}(t) &= S_{\text{loop}, ll}^{1121}(t) - i\dot{n}_l(t) \end{aligned}$$

$$\left[\begin{aligned} W_{il}(t) &= \begin{pmatrix} \mathbf{y}_{il}(t) & \mathbf{z}_{il}(t) \end{pmatrix} \\ ((\mathbf{s}, \mathbf{t}))_t &= \sum_i \mathbf{s}_i^\dagger(t) \sigma_3 \mathbf{t}_i(t) \\ \sigma_3 &: \text{Pauli 第3行列} \end{aligned} \right]$$

繰り込み条件

$$S_{l_1 l_2}^{1111}(t) + S_{l_2 l_1}^{1111,*}(t) = 0$$

$$S_{l_1 l_2}^{1122}(t) + S_{l_2 l_1}^{1122}(t) = 0$$

$$S_{ll}^{1121}(t) = 0$$

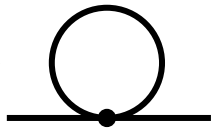
← $\left[\text{Re } S_{ll} = 0 \text{ の一般化} \right]$

$\delta T_{ij}^{\alpha\beta}(t)$ を決定

→ $\dot{n}_l(t)$ を決定

それぞれリーディングで計算

$$\left. \begin{aligned} S_{\text{loop}, l_1 l_2}^{1111} \\ S_{\text{loop}, l_1 l_2}^{1122} \end{aligned} \right\}$$



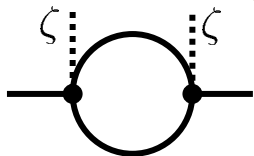
$$\delta T_{ij} = \delta_{ij} U \begin{pmatrix} 2\tilde{n}_i & \tilde{m}_i \\ -\tilde{m}_i^* & -2\tilde{n}_i \end{pmatrix}$$

$$\left[\begin{aligned} \tilde{n}_i &= \langle 0 | \varphi_i^\dagger \varphi_i | 0 \rangle \\ \tilde{m}_i &= \langle 0 | \varphi_i \varphi_i | 0 \rangle \end{aligned} \right]$$

$$i\dot{W}_{il} = \sum_{ij} [T_{0,ij} + \delta T_{ij}] W_{jl}$$

→ ζ_i と n_l に依存

$$S_{\text{loop}, ll}^{1121}$$



→ 量子輸送方程式
(具体形は次のスライド)

量子輸送方程式

遷移確率

衝突項

$$\dot{n}_\ell(t) = 4U^2 \text{Re} \sum_{\ell_1 \ell_2} \int_0^t ds [C_1[\zeta, W; t] C_1^*[\zeta, W; s] \{n_{\ell_1} n_{\ell_2} (1 + n_\ell) - (1 + n_{\ell_1})(1 + n_{\ell_2}) n_\ell\}_s$$

$$+ C_2[\zeta, W; t] C_2^*[\zeta, W; s] \{n_{\ell_1} (1 + n_{\ell_2})(1 + n_\ell) - (1 + n_{\ell_1}) n_{\ell_2} n_\ell\}_s$$

$$+ C_3[\zeta, W; t] C_3^*[\zeta, W; s] \{(1 + n_{\ell_1}) n_{\ell_2} (1 + n_\ell) - n_{\ell_1} (1 + n_{\ell_2}) n_\ell\}_s$$

$$+ C_4[\zeta, W; t] C_4^*[\zeta, W; s] \{(1 + n_{\ell_1})(1 + n_{\ell_2})(1 + n_\ell) - n_{\ell_1} n_{\ell_2} n_\ell\}_s]$$

ζ と W に依存

過去の時刻に依存

2 to 1 や 1 to 2 の散乱過程



3粒子生成・消滅過程



$$C_4[\zeta, W; t] C_4^*[\zeta, W; s] \sim \delta(\omega_{\ell_1} + \omega_{\ell_2} + \omega_\ell)$$

少なくとも一つ負の励起モード

Landau不安定性があるときに効いてくる

$$(1 + n_{\ell_1})(1 + n_{\ell_2})(1 + n_\ell) - n_{\ell_1} n_{\ell_2} n_\ell > 0$$

熱緩和を妨げる

最後に $\zeta_i(t)$ を決める!

時間依存Gross-Pitaevskii方程式

少しおさらい...

$$\delta C_i = i\dot{\zeta}_i - \sum_{ij} h_{0,ij} \zeta_j \quad \left[\delta C_i \Rightarrow \varphi_i \text{の1次に対するカウンター項} \right]$$

$\delta C_i \Rightarrow$ 場の分割条件 $\langle 0 | \varphi_{H,i}^{\mu\alpha} | 0 \rangle = 0$ を摂動計算することで決める!

計算すべきダイアグラムは?

$$\hookrightarrow \dot{N}_{\text{ex}} = \frac{d}{dt} \sum_i \tilde{n}_i = \underbrace{2U \text{Im} \sum_i \zeta_i^2 \tilde{m}_i^*}_{\text{1次}} + \underbrace{\sum_\ell \dot{n}_\ell(\mathbf{y}_\ell, \mathbf{y}_\ell)}_{\text{2次}} \quad \left[N_{\text{ex}} : \text{非凝縮粒子数} \right]$$

$$\langle 0 | \varphi_{H,i}^{\mu\alpha} | 0 \rangle = \underbrace{\text{---} \times \frac{d}{dt} \text{---}}_{i \frac{d}{dt} - h_0} + \underbrace{\text{---} \bullet \text{---}}_{\text{1次}} + \underbrace{\text{---} \times \text{---}}_{\gamma} = 0$$

時間依存Gross-Pitaevskii (TDGP)方程式

$$i\dot{\zeta}_i(t) = \sum_j (h_{0,ij}(t) + \delta_{ij} 2U \tilde{n}_i(t)) \zeta_j(t) + U \tilde{m}_i(t) \zeta_i^*(t) - i\gamma(t) \zeta_i(t)$$

$$\gamma = \frac{1}{2N_c} \sum_\ell \dot{n}_\ell(\mathbf{y}_\ell, \mathbf{y}_\ell) \quad \left[N_c : \text{凝縮粒子数} \right]$$

$\hookrightarrow W_{il}$ と n_ℓ に依存

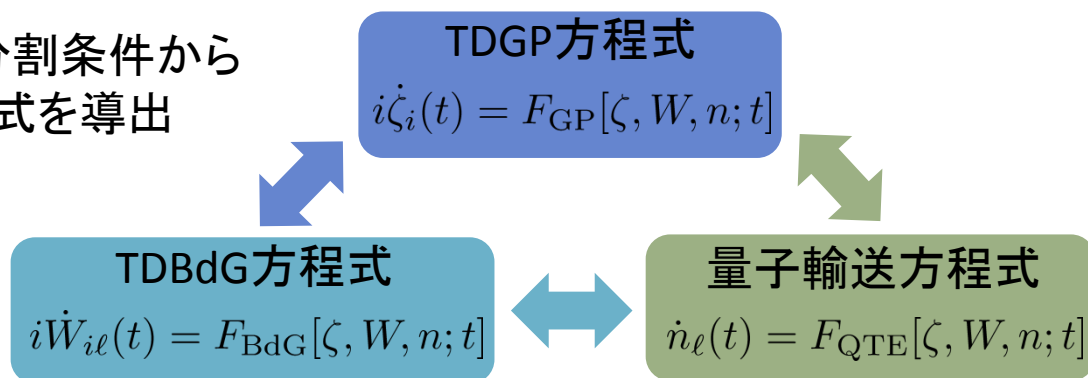
TDGP、TDBdG、量子輸送方程式を連立することで系の時間発展を解析

まとめ

一次元調和振動子&光学格子ポテンシャル中に
捕捉された冷却中性BEC系に非平衡TFDを適用



自己無撞着な繰り込み条件・場の分割条件から
系の時間発展を記述する3つの方程式を導出



今後の課題

- 得られた方程式を数値計算し、系の非平衡過程のシミュレーション
- 特に、Landau不安定性がある・なしに注目