

平均場近似に基づく磁気双極子フェルミ気体の静的性質の解析

理科教育専攻 理科内容学領域（物理学）

新鶴田 道也

概要

2012 年、磁気双極子フェルミ気体が ^{161}Dy 原子を用いて初めて実現された。この実験において、実現された気体に磁気双極子 - 双極子相互作用が働いていることを示唆する結果が得られた。磁気双極子フェルミ気体の実現が可能になったことにより低温における物質の新しい振る舞いが発見される可能性が高まっている。これまでの理論研究において強磁性ネマチック相やスピン軌道結合相、反強磁性スメクチック C 相などの新しい秩序相の出現が予測されている。

本論文では磁気双極子フェルミ気体が示す静的性質を平均場近似に基づいて解析する。具体的には双極子-双極子相互作用と接触型相互作用の強さに対して常磁性 - 強磁性ネマチック相転移の相図を得る。また非完全強磁性相におけるスピン 2 成分の混合状態を含む平均場理論の定式化を行う。

1 序論

1.1 フェルミ粒子系における平均場近似

気体は多数の電氣的に中性な原子または分子の集団である。多数の原子によって構成された気体がどのような性質を示すのかという問題は多体問題であり、一般にその問題を直接扱うことは難しい[1]。

平均場近似とは多体問題を平均的なポテンシャル中を運動する 1 体問題として近似をし、そのポテンシャルを自己無撞着に決定する方法である[2]。原子構造の問題を良く説明しその他にも広く用いられる平均場近似に Hartree 近似がある[3]。Hartree 近似では N 個の粒子の中から 1 つの粒子に着目し 2 粒子間相互作用

を平均化したポテンシャルで表す (図 1)。

Hartree 近似を、同種粒子系において量子統計性を考慮し特にフェルミ粒子系に対して応用させたものに Hartree-Fock 近似がある。Hartree-Fock 近似ではフェルミ粒子系の N 粒子波動関数 $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ を次の Slater 行列式で表す。

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \begin{vmatrix} \phi_1(\mathbf{r}_1) & \dots & \phi_N(\mathbf{r}_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(\mathbf{r}_N) & \dots & \phi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}$$

ここで $\phi_1(\mathbf{r}_1)$ は 1 粒子波動関数で座標 \mathbf{r}_1 に存在する粒子が状態 1 であることを示す。この近似では 1 粒子波動関数が従う Hartree-Fock 方程式を解くことで 1 粒子のエネルギーを求めることができる。そして得られた 1 粒子エネルギーから系全体のエネルギーを計算することができる。

本研究では多体問題における平均場近似の中でもフェルミ粒子系に対してよく用いられる手法である Hartree-Fock 近似を使用することで磁気双極子フェルミ気体の静的性質の解析を試みる。

1.2 冷却原子気体の磁性

冷却原子気体の磁性はスピン自由度をもつ Bose-Einstein 凝縮体について研究されてきた[4]。これらの磁性については、スピンに依存する弱い接触型相互作用の効果として説明されてきた。

フェルミ気体においては 2009 年に MIT の Jo らによって強く相互作用するフェルミ気体の強磁性が実験的に研究され、大きな注目を浴びている[5]。Jo らはスピン 2 成分をもつ ^6Li 原子を光学双極子トラップポテンシャル中に閉じ込めて、Feshbach 共鳴によって斥力の接触型相互作用を調整することで強磁性秩序状態への相転移を示唆する結果を得た。

1.3 磁気双極子フェルミ気体

本研究の対象は磁気双極子フェルミ気体である。フェルミ気体とボース気体の大きな違いは、極低温において希薄なフェルミ気体は s 波散乱による接触型相互作用をしない点である。これはフェルミ粒子の従う

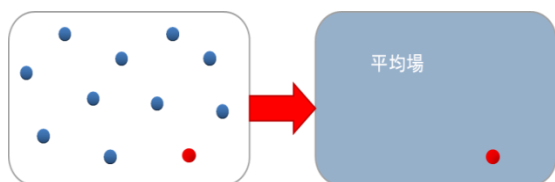


図 1：平均場近似のイメージ

Pauli の排他律において同じ状態に2個以上の粒子が占有できないということからの帰結である。1999年にフェルミ縮退した気体をはじめて実現したのはアメリカ Colorado 大学のグループで 40K の希薄原子気体を用いてフェルミ温度の $1/4$ 倍程度のフェルミ気体を実現した[6]。フェルミ気体は粒子間に引力が働くと、ペアをつくることで超流動状態になり得る[7]。また冷却原子の実験では Feshbach 共鳴を用いることによって、BCS - BEC クロスオーバーというフェルミ粒子系特有の現象が観測された[8,9]。

2012年にアメリカ Stanford 大学の Lu らは ^{161}Dy のフェルミ気体をフェルミ温度の 0.2 倍まで冷却することに成功した[10]。これはフェルミ気体における磁気双極子気体としては初めての実験である。Lu らはレーザー冷却と蒸発冷却をもちいて気体を 150nK 程度まで冷却した。この実験ではボース粒子である ^{162}Dy の気体とフェルミ粒子である ^{161}Dy の気体を混合することによって蒸発冷却を促進し非常に低い温度を実現した。更に Lu らは ^{161}Dy のみであってもフェルミ温度の 0.7 倍まで冷却できたことから気体の磁気双極子 - 双極子相互作用の効率を間接的に測定した。

これらの実験研究に対して、一様系における理論的解析も盛んに行われてきた。まず外部磁場によって偏極されたフェルミ気体が解析された。2008年に双極子 - 双極子相互作用するフェルミ気体において、その相互作用の大きさに応じてフェルミ面が変形することが示された[11,12]。そこでは変形したフェルミ面の形状を回転楕円体として近似する変分法が Miyakawa らによって提唱された。また Chan[13] や Ronen[14] はゼロ音波の解析を行った。

スピン2成分をもつ磁気双極子フェルミ気体においては、2009年 Fregoso が強磁性状態とフェルミ面の球対称性が自発的に破られた状態をあわせもつ強磁性ネマチック相の出現を予測した[15]。更に Fregoso は計算を拡張しスピン2成分が混合した強磁性ネマチック相を摂動論に基づいて解析した[16]。その他の興味深い秩序相として、運動量空間においてスピン渦が発生するスピン軌道結合相[17]や、1次元的に周期構造をもちスピンの揃った層を形成する反強磁性スメクチック C 相[18]の出現が予測されている。

1.4 本研究の目的

本研究では絶対零度においてスピン2成分をもち、

非等方的な双極子 - 双極子相互作用と、s波散乱に基づく短距離接触型相互作用が働く一様系を対象とする。まず完全強磁性ネマチック相と常磁性相の2つの相における基底エネルギーを比較することで完全強磁性ネマチック相の発生条件を予測する。その際2つの相のエネルギーは Hartree-Fock 近似を用いた自己無撞着計算によって解析される。

また非完全強磁性相の出現を予測するためにスピン2成分混合状態を含む平均場理論の定式化を行う。

2 磁気双極子フェルミ気体の強磁性ネマチック相

2.1 モデルと定式化

スピン2成分(\uparrow, \downarrow)をもつ原子数 N の磁気双極子フェルミ気体を考える。気体を構成する原子は磁気モーメントをもち、原子間には磁気双極子 - 双極子相互作用が働く。平均場近似に基づき、2原子間の相互作用による影響を平均場ポテンシャルで表すとハミルトニアンは以下ようになる。

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_{i>j} [V_c(\mathbf{r}) + V_{dd}(\mathbf{r})]$$

第1項は各粒子の運動エネルギーの和であり、第2項は2原子間相互作用の和を示す。2原子間相互作用において接触型相互作用 $V_c(\mathbf{r})$ と双極子 - 双極子相互作用 $V_{dd}(\mathbf{r})$ を考える。

接触型相互作用ポテンシャルを

$$V_c(\mathbf{r}) = g\delta(\mathbf{r})\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\beta\beta'}$$

と表す。 $\delta(\mathbf{r})$ は Dirac のデルタ関数であり、2原子の座標が一致（接触）した時のみ相互作用をすることを示す。ここで定数 $g = 4\pi\hbar^2 a/m$ で[19]、 a は散乱長、 m は1粒子の質量である。 $g > 0$ で斥力、 $g < 0$ で引力相互作用を表す。Feshbach 共鳴によって散乱長 a を実験的に調節することができるため、接触型相互作用の強さを調整することができる。 $\delta_{\alpha\alpha'}$ は Kronecker のデルタであり、これは接触型相互作用においてスピン角運動量が保存することを表している。

双極子 - 双極子相互作用ポテンシャルは

$$V_{dd}(\mathbf{r}) = \frac{d^2}{r^3} \{1 - 3\cos^2\theta\}$$

である。ここで \mathbf{r} は2原子の相対座標、 d は1原子のもつ磁気モーメントの大きさである。双極子 - 双極子相互作用とは2つの原子のもつ磁気双極子によって

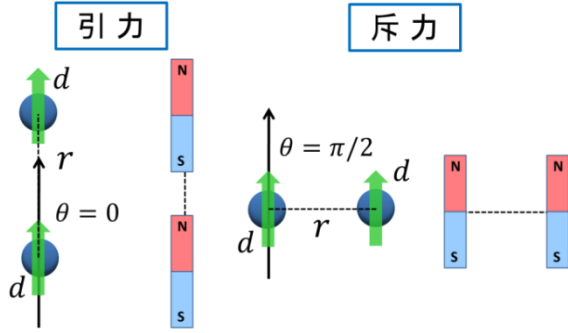


図2：磁気双極子 - 双極子相互作用を表すモデル

働く相互作用で、その性質は互いの相対距離とスピンの向きに依存する。2原子間に働く力の向きについては2つの磁石によるモデルと同様に理解され（図2）、その位置関係と向き（角度 θ で表す）によって引力や斥力になる。

2原子間相互作用ポテンシャルの Fourier 変換は、 $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ としてそれぞれ以下の通りである。

$$V_c(\mathbf{q}) = g$$

$$V_{dd}(\mathbf{q}) = -\frac{4\pi d^2}{3} \{1 - 3 \cos^2 \theta_q\}$$

Hartree-Fock 近似に基づいた解析によって、1粒子エネルギーの表式を次のように得た。

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + S(\varepsilon)$$

右辺の第1項は1粒子の運動エネルギーで、第2項は平均場ポテンシャルによる寄与を示す。第2項 $S(\varepsilon)$ はそれ自身が1粒子エネルギーに依存しているため、この方程式の解析解を得ることはできない。このような非線形方程式は自己無撞着な数値計算によって解析することができる。計算過程は以下の通りである。まず適当な値を1粒子エネルギーの初期値 ε_0 として $S(\varepsilon_0)$ を定義し、 $\varepsilon(k)$ を計算して新たな1粒子エネルギーを得る。この1粒子エネルギーを用いて $S(\varepsilon)$ を定義し直してまた計算する。この作業を繰り返し行い、つじつまの合う解が得られたところでその解を真の1粒子エネルギーとする（図3）。

1粒子エネルギーが得られたら、それを用いて全系のエネルギーを計算することができる。こうして得られた絶対零度における完全強磁性ネマチック相の基底エネルギーは

$$E_{FN}^{HF} = \sum_k^{k_N} \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{1}{2} S(k) \right]$$

である。また常磁性相における基底エネルギーは

$$E_{PM}^{HF} = 2 \sum_k^{k_{N/2}} \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + g \frac{N}{4} \right]$$

である。基底状態においてはこれら2つのエネルギーのうち、より低い状態が安定して存在する。

2.2 計算結果と考察

完全強磁性ネマチック

相における全系のエネルギー

図3：自己無撞着計算

と常磁性相における全系のエネルギーを比較することにより完全強磁性ネマチック相の出現を予測する。図4は双極子 - 双極子相互作用の強さを表す定数 $\lambda d = d^2 n / \varepsilon_F$ と接触型相互作用の強さを表す定数 $\lambda s = g n / \varepsilon_F$ に対する磁気相図である。 n は粒子数密度、 ε_F は相互作用しない気体のフェルミエネルギーである。2つの相互作用が強い領域では強磁性ネマチック相 (Ferronematic) が出現し、相互作用が弱い領域では常磁性相 (Paramagnetic) が出現する。

図4における実線は Hartree-Fock 近似 (HF) に基づく自己無撞着計算による解析結果で、破線はフェルミ面を回転楕円体として近似する変分法 (VM) による結果である。これらは双極子 - 双極子相互作用の弱い領域ではほとんど一致しているが、双極子 - 双極子相互作用の強い領域では違いが現れてくる。これは双極子 - 双極子相互作用の非等方的な性質によってフェルミ面が大きく変形する場合では、その形状は回転楕円体から外れることを意味する（図5）。

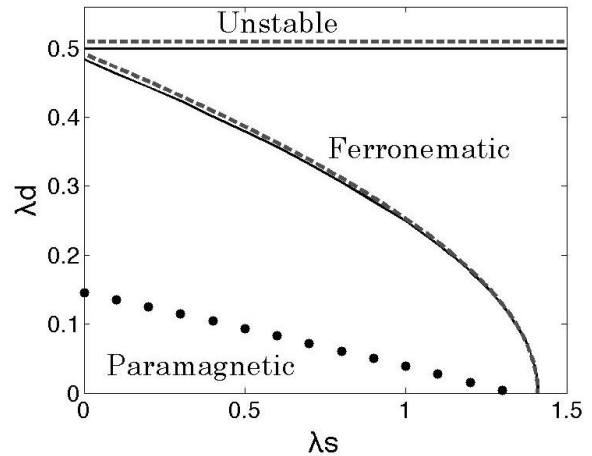


図4：磁気双極子フェルミ気体の磁気相図

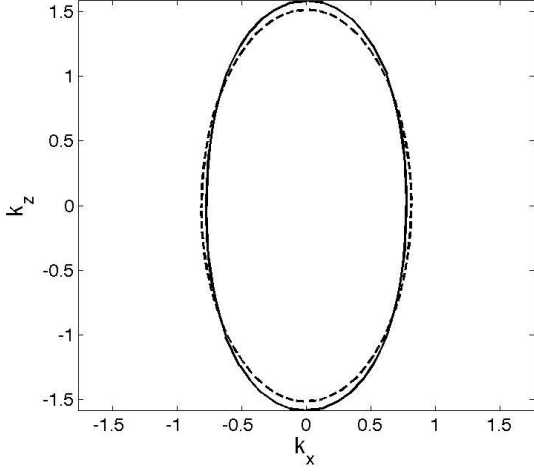


図5：強磁性ネマチック相におけるフェルミ面
($\lambda d = 0.495$, 実線：HF, 破線：VM)

図4における点線は常磁性相におけるゼロ音波の振動数を乱雑位相近似（RPA）に基づいて解析した結果であり[17]，点線以上で常磁性相が不安定となることを示す。

また気体の圧縮率を計算することにより気体の引力崩壊を予測した。（図4，Unstable）

3 スピン2成分混合を含む平均場理論の定式化

図4における RPA に基づく境界線（点線）より相互作用の強い領域（右上）では常磁性相が不安定となるため磁化していると考えられるが，完全強磁性ネマチック相ではない。この領域を明らかにするためには非完全な強磁性相の解析を正確に行う必要がある。したがって双極子 - 双極子相互作用のためにスピン2成分が混合する効果を含む平均場理論の定式化を行う。

3.1 モデルと定式化

スピン2成分系における双極子 - 双極子相互作用ポテンシャルはスピン2成分におけるパウリのスピン行列 σ として，

$$V_{dd}(\mathbf{r}) = \frac{d'^2}{r^3} [\sigma_{\alpha\alpha'} \cdot \sigma_{\beta\beta'} - 3(\sigma_{\alpha\alpha'} \cdot \hat{\mathbf{r}})(\sigma_{\beta\beta'} \cdot \hat{\mathbf{r}})]$$

と表される。双極子 - 双極子相互作用は2原子間の相対座標 \mathbf{r} とそれぞれの持つスピンの方向に依存する。ここで d' は粒子のもつ磁気双極子モーメントに $\hbar/2$ をかけたものであり， $\hbar/2$ は Pauli のスピン行列に由来する。

双極子 - 双極子相互作用ポテンシャルの Fourier

変換は相対運動量 $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ を用いて

$$V_{dd}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi d'^2}{q^3} [3(\sigma_{\alpha\alpha'} \cdot \hat{\mathbf{q}})(\sigma_{\beta\beta'} \cdot \hat{\mathbf{q}}) - \sigma_{\alpha\alpha'} \cdot \sigma_{\beta\beta'}]$$

と表される。この相互作用ポテンシャルは2原子間相互作用の過程におけるスピンの組み合わせ 16 通りそれぞれにおいて計算される。

ここで2つのスピン成分 (\uparrow, \downarrow) がある割合 ($|u_k|^2$ または $|v_k|^2$) で混合している状態 $c_{k+}^\dagger, c_{k-}^\dagger$ をエネルギー固有状態と考えてハミルトニアンをカノニカル変換する。新しく定義されたスピン2成分混合状態は

$$\begin{aligned} c_{k+}^\dagger &= u_k^* a_{k\uparrow}^\dagger + v_k a_{k\downarrow}^\dagger \\ c_{k-}^\dagger &= -v_k^* a_{k\uparrow}^\dagger + u_k a_{k\downarrow}^\dagger \end{aligned}$$

と表される。ただしフェルミ粒子の反交換関係

$$\begin{aligned} \{c_{k+}^\dagger, c_{k'++}\} &= \delta_{kk'} \\ |u_k|^2 + |v_k|^2 &= 1 \end{aligned}$$

を満たす。ここで $a_{k\uparrow}^\dagger, a_{k\downarrow}^\dagger$ はそれぞれスピン \uparrow, \downarrow の原子の生成演算子である。

ハミルトニアンのカノニカル変換を行うと v_k, u_k や2つの1粒子エネルギー $E_{k\pm}$ の表式が次のように求まる。

$$v_k = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{S_k}{\sqrt{S_k^2 + \Delta_k^2}} \right]^{1/2}$$

$$u_k = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{S_k}{\sqrt{S_k^2 + \Delta_k^2}} \right]^{1/2}$$

$$E_{k\pm} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \sqrt{S_k^2 + \Delta_k^2}$$

$E_{k\pm}$ の右辺第2項は平均場ポテンシャルによる寄与を示す。平均場ポテンシャル Δ_k はスピン混合状態においてのみ生じる項で，その他の項をまとめて S_k とおいた。

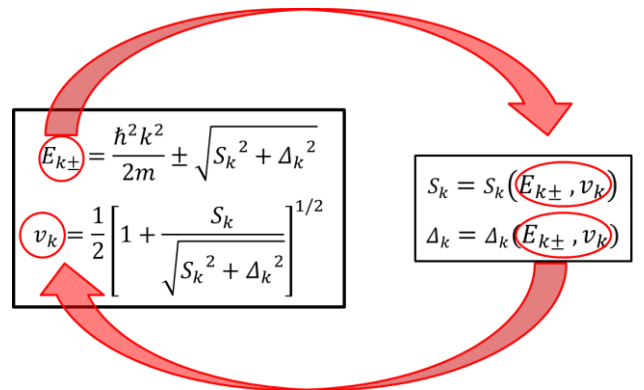


図6：スピン2成分混合系の自己無撞着計算

3.2 自己無撞着な計算過程

全節で得た平均場ポテンシャル Δ_k と S_k はそれぞれ1粒子エネルギー $E_{k\pm}$ に依存しているが、図6に示す自己無撞着な計算過程を踏むことで解析することができる。この場合は1粒子エネルギー $E_{k\pm}$ とスピン2成分の混合を表す v_k の初期値をまず代入して自己無撞着計算をする。

4 結論

絶対零度における基底状態のスピン2成分磁気双極子フェルミ気体を対象とした。磁気双極子フェルミ気体には2つの相互作用が働く。等方的な短距離反発力を示す接触型相互作用と、比較的長距離まで働き非等方的な双極子-双極子相互作用である。磁気双極子-双極子相互作用は2原子の相対座標とスピンの向きによって引力にも斥力にもなり得るという特徴をもつ。これら2つの相互作用を考慮して Hartree-Fock 近似に基づいた自己無撞着計算を行った結果、強磁性ネマチック相の出現可能性を先行研究より正確に予測することができた。

本解析では磁気双極子フェルミ気体の磁気相図を得ることで、先行研究の手法であるフェルミ面を回転楕円体として近似する変分法の有効性を検証すると共に、双極子-双極子相互作用が強い領域においては変分法による結果が外れることを示した。また双極子-双極子相互作用の引力による気体崩壊の予測においても、Hartree-Fock 近似に基づく結果と変分法による結果には差異が見られた。

さらに非完全強磁性相の出現を予測するためにスピン2成分の混合状態を含む平均場理論の定式化を行った。双極子-双極子相互作用にはスピンを混合させる働きがあるため、スピン2成分が混合した状態をエネルギー固有状態としてカノニカル変換を行い1粒子エネルギーとスピン混合比の表式を得た。この定式化は自己無撞着な計算手法を用いることによって解析することができ、強磁性ネマチック相や常磁性相、非完全強磁性相、スピン軌道結合相など様々な秩序状態を記述できる汎用性の高い理論である。

参考文献

- [1] 高野文彦『多体問題』(培風館)
- [2] 中嶋貞雄『超伝導入門』(培風館)
- [3] 小出昭一郎『量子力学 (II)』(裳華房)
- [4] J. Stenger et al., *Nature* **396**, 345 (1998)
- [5] G. B. Jo, Y. R. Lee, J. H. Choi, C. A. Christensen, T. H. Kim, J. H. Thywissen, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, *Science* **325**, 1521 (2009)
- [6] B. DeMarco and D. S. Jin, *Science* **285**, 1703 (1999)
- [7] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957)
- [8] C. A. Regal, M. Greiner, and D. S. Jin, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 040403 (2004)
- [9] M. W. Zwierlein, C. A. Stan, C. H. Schunck, S. M. F. Raupach, A. J. Kerman and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 120403 (2004)
- [10] M. Lu, N. Q. Burdick, and B. L. Lev, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 215301 (2012)
- [11] T. Miyakawa, T. Sogo, and H. Pu, *Phys. Rev. A* **77**, 061603(R) (2008)
- [12] T. Sogo, L. He, T. Miyakawa, S. Yi, H. Lu, and H. Pu, *New Journal of Physics* **11**, 055017 (2009)
- [13] C.-K. Chan, C. Wu, W.-C. Lee, and S. D. Sarma, *Phys. Rev. A* **81**, 023602 (2010)
- [14] S. Ronen and J. L. Bohn, *Phys. Rev. A* **81**, 033601 (2010)
- [15] B. M. Fregoso and E. Fradkin, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 205301 (2009)
- [16] B. M. Fregoso and E. Fradkin, *arXiv:1001.4167v4 [cond-mat.quant-gas]* (2010)
- [17] T. Sogo, M. Urban, P. Schuck, T. Miyakawa, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 031601 (2012)
- [18] K. Maeda, T. Hatsuda, and G. Baym, *arXiv:1205.1086v1 [cond-mat.quant-gas]* (2012)
- [19] C. J. Pethick and H. Smith『Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases』(Cambridge)
- [20] 和達三樹『物理のための数学』(岩波書店)
- [21] 小形正男『量子力学』(裳華房)