

博士論文

極低温原子系の動的相転移現象に関する
理論的研究

Theoretical study on dynamical phase transitions
in ultra-cold atomic systems

2020年1月

名古屋工業大学大学院 物理工学専攻

清水 啓太

指導教員：一瀬 郁夫 教授

目次

第 1 章	冷却原子系	6
1.1	量子シミュレータ	6
1.2	冷却手法	6
1.2.1	レーザー冷却	7
1.2.2	蒸発冷却	8
1.3	測定方法	9
1.3.1	Time of Flight 法	9
1.3.2	In Situ 法	10
1.4	量子渦	10
第 2 章	光学格子と Bose-Hubbard モデル	13
2.1	AC-Stark 効果	13
2.2	光学格子	14
2.3	Bose-Hubbard モデル	17
2.4	平均場近似手法	20
2.4.1	Static Bosonic Gutzwiller 法	20
2.4.2	Time-Dependent Bosonic Gutzwiller 法	21
第 3 章	相転移と Kibble-Zurek 機構	24
3.1	相転移	24
3.2	臨界指数	25
3.3	動的量子相転移	26
3.4	古典的 Kibble-Zurek 機構	28
3.5	量子的 Kibble-Zurek 機構	30
3.6	Kibble-Zurek 機構の実証実験	31
第 4 章	2 次量子相転移での クエンチダイナミクス	36
4.1	モデルと数値計算手法	36

4.2	実験プロトコルにおけるシミュレーション	38
4.3	Kibble-Zurek プロトコルにおけるシミュレーション	41
4.4	クエンチ後の振る舞い	46
4.5	まとめ	47
第5章	1 次量子相転移での クエンチダイナミクス	49
5.1	モデルと相図	49
5.2	DW 相から SF 相へのクエンチ	51
5.3	SF 相から DW 相へのクエンチ	55
5.3.1	Gutzwiller 法で得られた初期状態	55
5.3.2	揺らぎを含む初期状態	59
5.4	Hard-core Bose-Hubbard モデル	61
5.5	まとめ	62
第6章	複数の2次量子相転移が存在する クエンチダイナミクス	65
6.1	モデルと最近接斥力相互作用の強い場合の相図	65
6.1.1	拡張 Bose-Hubbard モデル	65
6.1.2	相図	66
6.2	DW 相から SS 相と DW 相から SF 相へのクエンチ	68
6.2.1	DW 相から SS 相	68
6.2.2	DW 相から SF 相	70
6.3	SF 相から SS 相を通り DW 相へのクエンチ	72
6.4	まとめ	75
第7章	まとめと総括	79
	参考文献	88

概要

近年、科学技術の目覚ましい発展は、物理学の研究においても大きな変革を生み出している。特にレーザー技術の進歩は、それまで実現不可能であった量子物理系を構築することを可能とした。その代表例の一つに「極低温原子系」が挙げられる。レーザーを用いた冷却技術の発展により、「極低温原子系」は量子多体系の研究において非常に重要な役割を担っている。量子多体系は相互作用の複雑さ等から扱いが非常に困難であるため、その研究においては、物理系をモデル化しシンプルなものへと置き換えることが有効である。「極低温原子系」は現実の物質をモデル化したものであり、パラメータ制御の容易さや不純物の無い系のため、「量子シミュレータ」と呼ばれている。さらに、レーザーを用いた「光学格子」と呼ばれる量子シミュレータも制御性の高さや実験で実現可能となった点から、理論・実験両側面での研究が活発に行われており一大分野を築いている。

古典系(温度パラメータ)における2次相転移を有限速度で横切る(クエンチ)ときの系の振る舞いは、非常に興味深い問題である。この問題は、宇宙論の観点からKibbleによって最初に指摘された。Kibbleは、相転移クエンチによって対称性の破れた局所領域が形成され、その結果、トポロジカル欠陥が生成されることを予想した。その後、Zurekにより同様な現象が超流動ヘリウムの様な凝縮系でも起こることが予想された。上記の機構は、Kibble-Zurek機構(KZM)と呼ばれ、理論・実験において多くの研究が行われてきた。KZMでは、2次相転移をクエンチした時の相関長やトポロジカル欠陥の形成について普遍的なスケーリング則を予想している。古典系の場合は、KZMを支持する多くの理論・実験研究からKZMの正当性が認められている。しかしながら、絶対零度下での量子系における量子相転移に関しては、理論・実験研究の不足によりKZMの正当性は、未解決な問題である。そこで、本博士論文では光学格子中の極低温原子系を用いて動的量子相転移を起こした場合の系の振る舞いについて研究を行う。モデルには、光学格子中の極低温原子系(ボース粒子系)の振る舞いを記述する2次元Bose-Hubbard(BH)モデルと最近接(NN)斥力相互作用を含んだ2次元拡張BH(EBH)モデルを用いる。特にクエンチが線形クエンチの場合の非平衡現象に着目し、2次元系において有効な時間依存Gutzwiller(t-GW)法を用いて研究を行う。このt-GW法は、近似を用いていながら実験結果を良く記述することが広く知られている。この手法は、1次元系において非常に強力な時間依存密度行列繰り込み群(t-DMRG)、time-evolving-block decimation (TEBD)等の手法が適用できない2次元系を扱える点が優れている。

我々は、2次元BHモデル、2次元EBHモデルにおけるKZMの適用可能性や1次相転移に対するスケーリング則の有無について系の振る舞いの詳細を追いつつ、調べていく。

また、本研究では、実際の実験における原子の選定・セットアップや結果の解釈・予測についての提案も行い、現実の物理現象に対して新たな知見を与えることも目的としている。

本博士論文は以下の様に構成されている。

第1章は、極低温原子系について冷却手法や測定方法の基礎事項をまとめている。

第2章は、光学格子の理論やBHモデル、GW法、t-GW法の詳細について説明をしている。

第3章は、相転移とそれに関わる臨界指数について述べ、本博士論文で中心となるKZM

の理論を古典系・量子系の両側面から紹介し、KZMの実証実験について触れる。

第4章は、Mott絶縁体(MI)相-超流動(SF)相間の2次元量子相転移クエンチについて、2次元BHモデルを用いて調べる。まず、実際のKZM実証実験[86]の結果との比較を行い、数値計算手法の有効性を示す。さらに、我々のシミュレーション結果(実験結果[86]と良い一致)とKZ予想のズレの原因について言及する。また、適切なKZプロトコルでのスケーリング則やクエンチ後の系の振る舞いについても調べる。最後に、実験のセットアップについて提案を行っている。

第5章は、弱いNN斥力相互作用を持つ2次元EBHモデルにおいて出現するDensity-wave(DW)相-SF相間の1次元量子相転移のクエンチダイナミクスについて調べる。一般的に、1次元相転移ではスケーリング則が成り立たないと広く信じられているが、EBHモデルの1次元量子相転移ではスケーリング則の存在を示唆する結果を得た。また、初期状態のわずかな違いにより、結果が大きく異なることが分かった。ある初期状態では、古典的なガラス転移に類似した現象を観測し、別の初期状態では、ドメインウォールで囲まれたドメインの形成を観測した。

第6章は、強いNN斥力相互作用を持つ2次元EBHモデルにおいて出現するDW相-Supersolid(SS)相間とSS相-SF相間の2つの2次元量子相転移間をクエンチした時の系のダイナミクスを調べる。相関長やトポロジカル欠陥密度を計算し、スケーリング則が成り立つかについて調べた結果、1つの2次元量子相転移の場合[99]とは異なる振る舞いが観測された。また、ここでも初期状態の違いにより向かう定常状態が大きく変化することも分かり、collapse-revival現象も見られた。さらに、ドメインウォールとトポロジカル欠陥との関係についても調べる。

第7章は、全体のまとめと総括を行う。

第4章から第6章の関連性について図1に図示している。

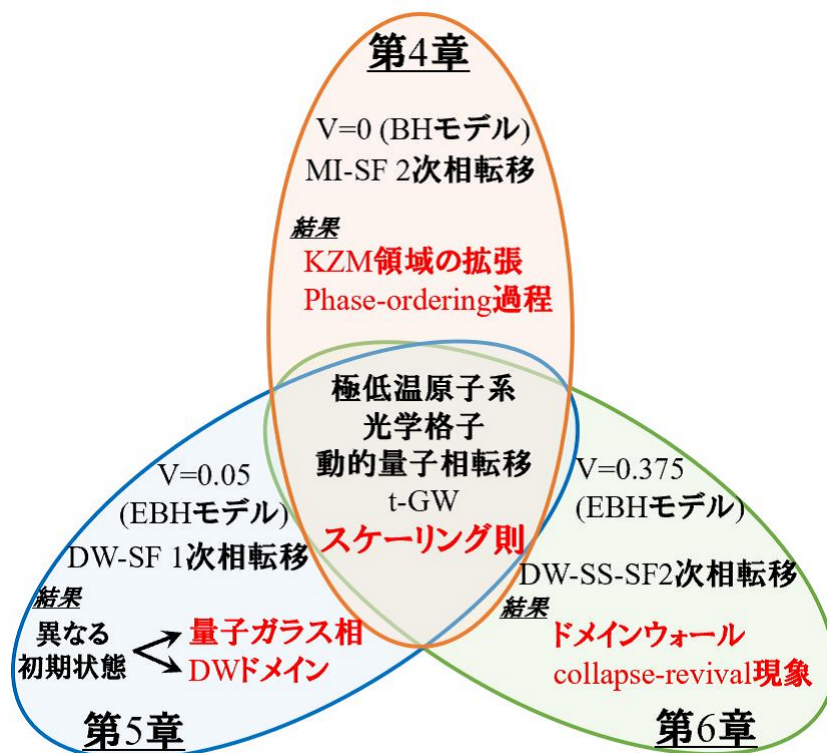


図1: 第4章から第6章の関連性やキーワードの図。中心は各章共通のキーワードを示している。

本博士論文は、

K. Shimizu, Y. Kuno, T. Hirano, and I. Ichinose, Phys. Rev. A **97**, 033626 (2018)

”Dynamics of a quantum phase transition in the Bose-Hubbard model: Kibble-Zurek mechanism and beyond”

K. Shimizu, T. Hirano, J. Park, Y. Kuno, and I. Ichinose, New J. Phys. **20**, 083006 (2018)

”Dynamics of first-order quantum phase transitions in extended Bose-Hubbard model: From density wave to superfluid and vice-versa”

K. Shimizu, T. Hirano, J. Park, Y. Kuno, and I. Ichinose, Phys. Rev. A **98**, 063603 (2018)

”Out-of-equilibrium dynamics of multiple second-order quantum phase transitions in an extended Bose-Hubbard model: Superfluid, supersolid, and density wave”

Y. Kuno, K. Shimizu, and I. Ichinose, Phys. Rev. A **95**, 013607 (2017)

”Bosonic Analogs of Fractional Quantum Hall State in the Vicinity of Mott States”

Y. Kuno, K. Shimizu, and I. Ichinose, New J. Phys. **19**, 123025 (2017)

”Various Topological Mott insulators in strongly-interacting boson system in one-dimensional superlattice”

に掲載されている論文の内容をまとめたものである。

第1章 冷却原子系

1.1 量子シミュレータ

近年、「量子シミュレータ」は、相互作用する大規模な量子系の静的・動的振る舞いを解明するために役立つ新しい研究手法であることが、認識されている。このアイデアは、ファインマンによる独創的な研究 [1] で提案された。そこでは、実験的に量子力学的設定が容易な量子系を使用して、別の量子系の動作を人工的に設計および制御・再現することを提案している。量子系を古典的なコンピュータで最大限シミュレートするためにどのくらいの大きさになるか推定した場合、その困難さが分かる。Spin $-1/2$ の N 粒子における量子系では、 2^N の状態が存在し、密度行列は 2^{2N} の要素を持つ。30 個の粒子が存在するだけでも、現在のコンピュータでは全状態を把握することはできない。このように、量子力学の法則を古典的なコンピュータに適用するのではなく、ある量子系を直接使用して別の量子系を調べるのが量子シミュレーションの考えである。それ以来、この革新的なアイデアは、理論物理学者と実験物理学者の間の多くの研究を生み、すでに非常に有望な結果をもたらしている [2-5]。新しい実験ツールを使用して、例えば、光学格子を使用した固体系のモデルを実験室で調整および調査できるようになった。これらの実験技術の向上により、これまで研究が困難であった重要な問題に取り組むことができるようになった。

ここでは、量子シミュレータについて調べ、その構成や原理、制限について述べる。特に、このようなシミュレーションの最も有望なプラットフォームの1つである「光学格子」について2.2節で述べる。

また、量子多体系での非平衡現象を数値シミュレートするのは、一般的にとっても挑戦的なことである。しかし、特に相互作用が存在する場合、解析的に完全に解決できる状況に限られていることを考慮すると、相互作用する量子系のダイナミクスを理解するためには、数値的アプローチが非常に重要である。本研究は、量子シミュレーションにより調べることが出来る物理現象の提案と結果の予測を行うものである。図 1.1 に本研究の意義・目的についてまとめた。

1.2 冷却手法

冷却原子ガスの BEC が最初に予想されてから 71 年後に始めて観測された。この「遅れ」は、原子を非常に低温まで冷却する技術の不足が主な原因であると考えられる。

冷却技術は主に 1980 年代から 1990 年初頭に開発され、1997 年にノーベル物理学賞が与えられた [6-8]。冷却技術のほとんどは、レーザーを使用する。ここでは、原子ガスをナノケルビンオーダーまで冷却することが出来る冷却技術について紹介する。冷却技術として、レーザー冷却と蒸発冷却を取り上げる。この技術を用いることで、1995 年にルビジウム、ナトリウム、リチウムのようなアルカリ原子気体の BEC が実現して以来、カルム、イッテルビウ

研究の意義・目的

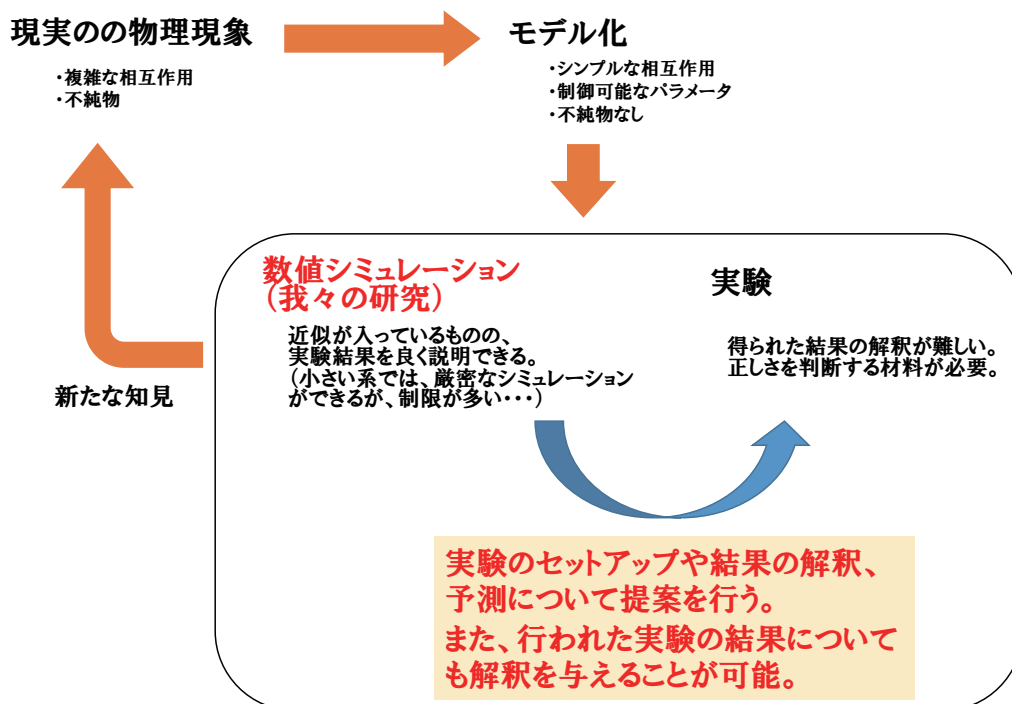


図 1.1: 本研究の意義と目的についての説明図。本研究の立ち位置とどのような研究を行ったかをまとめている。

ム、クロム、エルビウム等多くの種類で BEC が実現されている。

また本研究で主に用いる光学格子 (2.2 節) 上での実験において、高い制御性を実現するためには、自由度の数を減らすか、凍結する必要がある。これにより、原子をトラップして、原子ガスの加熱を防ぎ、実験を行うために原子を制御することもできる。

1.2.1 レーザー冷却

まず、原子ガスにレーザーを照射することで非常に低温まで冷却できるレーザー冷却 [9] について記していく。この技術は、簡単に言えば、動いている原子をレーザー光を用いて止める技術である。図 1.2 に示すように、反対方向に伝播するレーザービームの方向に移動する原子は、光子を吸収して、光子の運動量も吸収する。ドップラー効果により、レーザーの対向方向に運動する原子が選択的にレーザーを吸収し、内部励起状態になる。同時に、速度の反対方向の運動量を得て、速度を落とす。一方、光子の自然放出によって基底状態に戻る遷移が発生する場合、光子の放出方向はランダムであり、結果として生じる原子の反跳運動量の平均はゼロになる。こうして、レーザーに対向する原子はレーザー光で減速される。したがって、レーザー周波数を調整することにより、特定の速度領域の原子を冷却することが可能となる。これは、ドップラー冷却と呼ばれ、例えば ^{87}Rb であれば $150\mu\text{K}$ のオーダーまで冷やすことが出来る。S. Chu、C. Cohen-Tannoudji、W. D. Phillips は、1997 年にこの技術の開発によりノーベル物理学賞を受賞している。

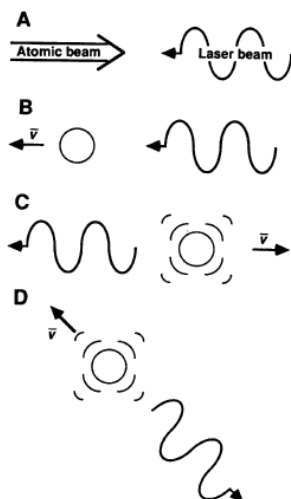


図 1.2: レーザー冷却過程の説明図。(A) 原子の動きと反対方向に伝播するレーザービームによるレーザー冷却。(B) レーザービームからの光子の吸収によって引き起こされる原子の速度変化。(C) 光子の自然放出から生じる速度変化。(D) 自然放出によるランダム反跳。[10]より引用。

1.2.2 蒸発冷却

レーザー冷却後、原子は通常磁気トラップに閉じ込められる。この段階では BEC となる温度には届いていない。そこで、BEC に必要な極低温（ナノケルビンオーダー）に達するために「蒸発冷却」[9]を使用する。

この冷却方法の原理は、我々の日常生活で行う行動に似ている。例えば、熱いコーヒーを冷やす時に息を吹きかけて熱気を飛ばす動作である。コーヒーから湯気として離れる水分子は、速度分布における高エネルギー領域にいる分子である。十分に高いエネルギー（速度）を持つ分子がポテンシャルを越えて系の外に逃げていく。そして、残された分子の平均速度が下がることで、温度が下がる。原子ガスを蒸発冷却するためにこれと類似の原理が使用されるが、主な違いとして、コーヒーでは越えるべきポテンシャルが液体中の水分子間の引力相互作用からきていたのに対して、原子ガスではポテンシャルが外部の磁気ポテンシャルから生じるという違いがある。このポテンシャルの高さは調整ができるため、冷却過程を最適化し、常に速度分布の高エネルギー側にある原子を逃がし、トラップ内に残っている原子の平均速度を下げることで冷却される（図 1.3）。この冷却技術を使用することにより、50~100nK という非常に低温に到達することが可能となった。



図 1.3: 蒸発冷却過程の説明図。高エネルギーを持つ原子を磁気ポテンシャルから逃がすことにより、ポテンシャル内の平均エネルギーが下がり、冷却される。[11]より引用。

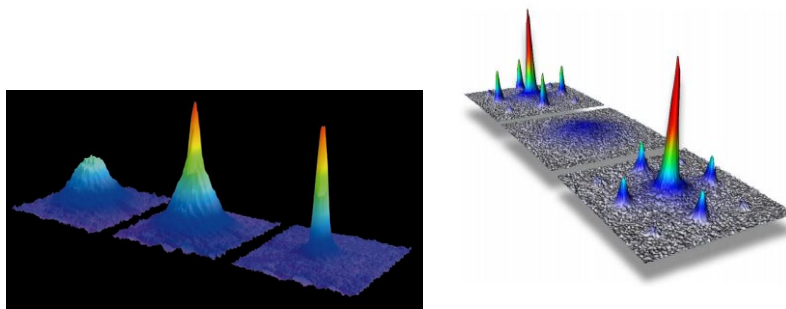


図 1.4: (左図) Ketterle グループにより観測された弱く相互作用する冷却原子ガスでの BEC 形成 (格子の無い系) を示す最初の ToF 画像の一つ。画像の中の左から、臨界温度 T_c 以上でのガウス分布の原子ガス \rightarrow 温度が T_c より低下 \rightarrow 運動量分布の鋭いピークが出現する (BEC 状態)。[15] より引用。(右図) Greiner グループによって観測された光学格子中のボソンの ToF 画像。鋭いピークを持つ状態は SF 状態であり、ピークを持たない状態は MI 状態であることを示す。[16] より引用。

1.3 測定方法

冷却原子の観測方法の主な手法は、吸収イメージング [2] である。原子雲は、電子遷移に共鳴するプローブレーザービームを照射され、原子雲を通過した後、CCD カメラで強度が増幅され観測される。原子雲の内部では、原子によって共鳴光が散乱 (自然放出) され、原子雲密度が高すぎない場合、原子雲密度に比例する量だけビームの強度が低下する。原子雲の密度 $n(\mathbf{r}) = \langle \psi^\dagger(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \rangle$ を測定することで、そこから幅広い特徴が推測される。そのうちのいくつかの例を以下に示す。

1.3.1 Time of Flight 法

多体状態の運動量分布 $n(\mathbf{k}) = \langle a^\dagger(\mathbf{k})a(\mathbf{k}) \rangle$ を決定するために一般的に使用される手法は、Time of Flight (ToF) imaging [15,16] である。この方法では、全てのトラップポテンシャル (および存在する場合は光学格子) が突然オフになり、原子雲が吸収イメージングされる前に時間間隔 t_{tof} で自由膨張する (通常 20 ミリ秒程度)。膨張する間、密度は減少し、相互作用の影響は小さくなる。初期の原子雲密度がイメージング時の膨張した原子雲密度と比較して無視できるとする近似では、相互作用は完全に無視され、測定された実空間密度分布はその時点での運動量分布と正確に関連付けできる。これにより、飛行時間の測定で多粒子状態の運動量分布を測定することができる。この手法では、図 1.4 に示すように、格子の無い系とある系の両方に適用できる。吸収イメージングは破壊測定法であるため、測定が行われるたびに一連の実験手順を繰り返す必要がある。

ToF を用いることで、Bose-Hubbard (BH) モデルでの異なる 2 つの相を区別することができる。例えば、深い Mott 絶縁体 (MI) 相では系が直積状態で記述され、相互作用の無い超流動 (SF) 相では系は完全なコヒーレント状態で記述される。長時間発展の場合、これは特にシンプルな ToF イメージで与えられる。MI 相での直積状態では、ToF イメージは平坦な分布で与えられる。対照的に、完全な SF 状態では、ToF の結果は強いピークを持つ [2,16] (図 1.4

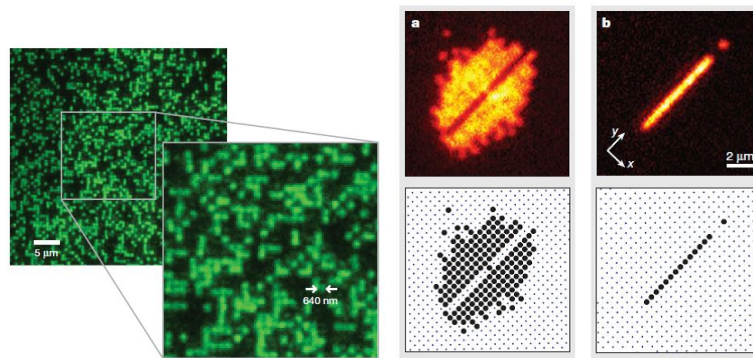


図 1.5: 量子ガス顕微鏡で観測された 2 次元光学格子中の冷却原子画像。高解像度の光学系を用いると、どちらの画像からも分かるように、単一サイトレベルで原子を観測することができる。(左図) Bakr らの実験により観測された原子配置。[21] より引用。(右図) Weitenber らの実験により観測された任意の形状の原子配置。この技術により、サイトごとに 1 つの原子を持つ MI 状態など任意の状態を準備できる。[22] より引用。

右)。それゆえ、ToF での測定は BH モデルの 2 つの相を区別することに適している。

1.3.2 In Situ 法

近年の技術発展により、高解像度の光学系を使用して個々のサイトレベルで原子の位置を測定することが可能となった [18, 20, 21]。手順は以下の通りである。最初に、格子を深くすることで、ワニア関数が非常に局所化され、サイト間のホッピングが強く抑制される。次に、レーザー光を原子に集束させ、散乱光を顕微鏡で観察する。この過程の間、原子はレーザー冷却されているため、各原子の何千もの光子を散乱させることができ、非常に高い分解能が得られる。この手法を用いると、粒子数の揺らぎを正確に捉えることができ、高解像度の画像を得ることに成功している [18, 20–22] (図 1.5)。この手法は、格子系における「量子ガス顕微鏡」で非常に力を発揮している。「量子ガス顕微鏡」は、光学限界に近い高解像度を可能とし、 μm 未満の格子間隔を持つ格子システムにおいて単一サイトの解像度で個々の原子を観察することができる。例えば、図 1.5 を参照せよ。

1.4 量子渦

ここでは、量子渦 (vortex) について説明する。まず、超流動体の振る舞いや BEC の励起について調べるのに役立つ方程式として時間依存 Gross-Pitaevskii (GP) 方程式 [12, 13] を用いる。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) + U|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.4.1)$$

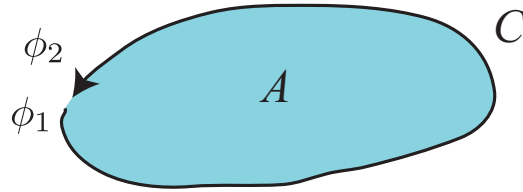


図 1.6: 領域 A を囲む閉じた曲線 C の循環図。 ϕ_1 、 ϕ_2 はそれぞれ始点、終点での凝縮体の位相。

ここで、 $\psi(\mathbf{r}, t)$ は凝縮体波動関数、 $V(\mathbf{r})$ は外部ポテンシャル、 U はオンサイト相互作用を表す。 GP 方程式は凝縮体波動関数 ψ の時間発展を記述する決定論的方程式である。 GP 方程式は超流動ヘリウムに対しては定性的な側面での記述でしか使用できないが、希薄原子ガス BEC では相互作用に起因する非凝縮成分は数パーセントであるため、凝縮体を仮定する GP 方程式は定量的にも良い記述を与える。(導出など詳細については、[9, 14] を参照)。式 (1.4.1) に左から ψ^* を掛け、その複素共役を元の式から差し引くと、連続の方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 + \frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi + \psi \nabla \psi^*) = 0 \quad (1.4.2)$$

を得る。この方程式は、線形シュレディンガー方程式から導出される標準の連続方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} n + \nabla \cdot (n\mathbf{v}) = 0 \quad (1.4.3)$$

と比較できる。ここで、粒子数密度 $n = |\psi|^2$ である。したがって、凝縮体の超流動速度場は、

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar}{2mi} \frac{\psi^* \nabla \psi + \psi \nabla \psi^*}{|\psi|^2} \quad (1.4.4)$$

となる。ここで、凝縮体の波動関数は一価関数であり、近似 $\psi = \sqrt{ne^{i\phi}}$ を用いる。 ϕ は波動関数の位相である。この近似を超流動速度場に用いると、

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar}{2mi} \frac{\psi^* \nabla \psi + \psi \nabla \psi^*}{|\psi|^2} = \frac{\hbar}{m} \nabla \phi \quad (1.4.5)$$

となり、位相をポテンシャルとするポテンシャル流れである。

ここで、領域 A を囲む閉じた曲線 C に循環 $\Gamma = \oint_C \mathbf{v} d\mathbf{l}$ の概念を導入すると役に立つ。

全ての空間領域に超流動体が存在する場合、単連結領域では、この循環は Stokes の定理よりゼロとなる。

$$\Gamma = \oint_C \mathbf{v} d\mathbf{l} = \frac{\hbar}{m} \oint_C \nabla \phi d\mathbf{l} = \frac{\hbar}{m} \int_A \nabla \times \nabla \phi = 0 \quad (1.4.6)$$

つまり、凝縮体の運動は非回転であることを示す。通常の流体で満たされた回転容器をゆっくり回転させる場合を考えると、流体は容器とともに回転する。対照的に、上記の結果では、凝縮体は回転容器内で静止しているように見える。

しかしながら、凝縮体の位相に特異点を持つような多重連結領域を考えると、波動関数の一価性から、閉じた輪郭 C を回る時の波動関数の位相の変化 $\nabla \phi = \phi_2 - \phi_1$ は 2π の整数倍でなければならない、循環の量子化が成り立つ。

$$\Gamma = \oint_C \mathbf{v} d\mathbf{l} = \frac{\hbar}{m} \oint_C \nabla \phi d\mathbf{l} = \frac{\hbar}{m} (\phi_2 - \phi_1) = 2\pi q \frac{\hbar}{m} \equiv q \frac{h}{m} \quad (1.4.7)$$

ここで、 q は特異点の巻き数を表す整数である。 $q \neq 0$ の場合渦流が存在し、 Γ の値は循環量子 h/m を単位として量子化されることが分かる。このように循環が量子化された渦を量子渦 (vortex) と呼ぶ。本博士論文でも、この vortex が非常に重要な役割を担う。Vortex の簡略図を図 1.7 に図示する。

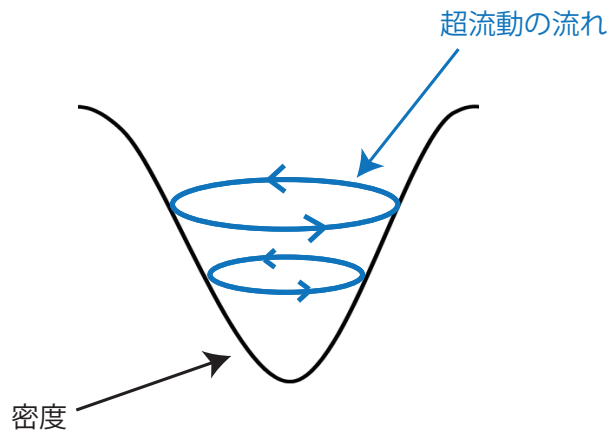


図 1.7: Vortex (量子渦) の概念図。黒線が密度を表し、青線が超流動の流れを表す。Vortex の中心は密度ゼロ (特異点) であり、その周りを超流動 (位相) が流れている。

第2章 光学格子と Bose-Hubbard モデル

2.1 AC-Stark 効果

光学ポテンシャルは、冷却原子のトラップ、および制御において重要な役割を果たす。それらは、AC-Stark 効果に基づく光学双極子力に依存している。AC-Stark 効果は、原子と時間的に振動する電場 $\mathbf{E}(t) = E_0 \mathbf{e} \cos(\omega t)$ との相互作用を表す。この場は原子に双極子モーメント $\mathbf{d}(t)$ を誘発し、外部場と同じ周波数 ω で周期的に振動する。以下で原理について説明する [9]。

駆動された古典的振り子と同様に、駆動周波数が原子の共鳴周波数よりもはるかに低い場合、原子の分極は同相で電場に追従し、引力ポテンシャルを導く。これは、アルカリ原子の量子力学的描像内で実証することができる。ここで、電子の基底状態を $|g\rangle$ 、基底状態のエネルギーを E_g 、励起状態を $|e\rangle$ 、励起状態のエネルギーを E_e とする。波動関数を係数 $c_g(t), c_e(t)$ (相互作用描像の状態振幅に対応) で展開すると、

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= c_g(t) e^{-iE_g t/\hbar} |g\rangle + \sum_e c_e(t) e^{-iE_e t/\hbar} |e\rangle \\ &= \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \end{aligned} \quad (2.1.1)$$

となる。運動方程式は時間依存シュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = (H_0 + H_{dip}(t)) |\psi(t)\rangle \quad (2.1.2)$$

によって導出される。ここで、 H_0 は固有状態 $|g\rangle$ と $\{|e\rangle\}$ を持つ非摂動ハミルトニアンを表し、ハミルトニアン $H_{dip}(t) = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}$ は電場と原子双極子演算子 \mathbf{d} との結合を表す。通常、励起状態 $|e\rangle$ はエネルギー的に十分に離れており、単一の励起状態のみを考慮した 2 準位系で分極を記述するので十分である。原子は非摂動ハミルトニアン H_0 の固有状態 m にあったとする。 $n \neq m$ の展開係数 c_n は、摂動 H_{dip} の 1 次の範囲で

$$c_n^{(1)} = \frac{E_0}{2\hbar} \langle n | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e} | m \rangle \left[\frac{e^{i(\omega_{nm} + \omega)t} - 1}{\omega_{nm} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{nm} - \omega)t} - 1}{\omega_{nm} - \omega} \right] \quad (2.1.3)$$

を得る。ここで $\omega_{nk} = (E_n - E_k)/\hbar$ である。動的な分極率 $\alpha(\omega)$ は、時間平均状態のエネルギーシフト $\Delta E_g = -\frac{1}{2} \langle E(\mathbf{r}, t)^2 \rangle_t \alpha(\omega)$ から

$$\alpha(\omega) = \sum_e \frac{2(E_e - E_g) |\langle e | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e} | g \rangle|^2}{(E_e - E_g)^2 - \hbar^2 \omega^2} \quad (2.1.4)$$

である。ここで、 $\langle \dots \rangle_t$ は時間平均を表す。この結果は、励起状態の寿命が無限であると仮定しているが、実際は光子の自然放出過程によって崩壊する。自発放出過程を組み込むには、現象論的に励起状態のエネルギーに複素エネルギー $E_e \mapsto E_e + \frac{i\hbar}{2} \Gamma_e$ を許容することにより、

考慮できる。ここで、実パラメータ Γ_e は励起状態 $|e\rangle$ の減衰率であり、回転波近似内（この近似は、電磁周波数 ω が絶対周波数スケールに対してエネルギー準位差 $(E_e - E_g)/\hbar$ に非常に近く、2つの項のうち小さいほうを無視する場合に適用される。）では、分極率 α は次の形式を取る。

$$\alpha(\omega) \approx \frac{(E_e - E_g - \hbar\omega)}{(E_e - E_g - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_e/2)^2} |\langle e|\mathbf{d}\cdot\mathbf{e}|g\rangle|^2 + i \frac{\hbar\Gamma_e/2}{(E_e - E_g - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_e/2)^2} |\langle e|\mathbf{d}\cdot\mathbf{e}|g\rangle|^2 \quad (2.1.5)$$

基底状態エネルギーのシフトを

$$\Delta E_g = V_g - i\hbar\Gamma_g \quad (2.1.6)$$

と書くと、原子に働く有効ポテンシャルの形をしている。実部はエネルギーシフト、虚部は基底状態の寿命に対応する。以下では、これらと分極率 $\alpha(\omega)$ の関係を見ていく。離調 δ の定義をレーザーの周波数と原子遷移の周波数との差

$$\delta = \omega - \frac{E_e - E_g}{\hbar} = \omega - \omega_{eg} \quad (2.1.7)$$

とし、Rabi 周波数を

$$\Omega_R = \frac{E_0}{2\hbar} |\langle e|\mathbf{d}\cdot\mathbf{e}|g\rangle| \quad (2.1.8)$$

とすると、分極率 α の実部に関して、電場強度に比例するポテンシャル（エネルギー準位のシフト）は、次のように記述できる。

$$V_g = -\frac{1}{2} \text{Re}(\alpha(\omega)) \langle \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)^2 \rangle_t = \frac{\hbar\Omega_R^2\delta}{\delta^2 + \Gamma_e^2/4} \quad (2.1.9)$$

基底状態から原子が失われる割合 Γ_g は、

$$\Gamma_g = \frac{1}{\hbar} \text{Im}(\alpha(\omega)) \langle \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)^2 \rangle_t = \frac{\hbar\Omega_R^2\Gamma_e}{\delta^2 + \Gamma_e^2/4} \quad (2.1.10)$$

となり、離調においてローレンツ型である。

もし周波数 ω が2状態の共振周波数（赤離調）よりも低い場合は双極子ポテンシャルは引力であり、 $\delta > 0$ （青離調）の場合に斥力となる。離調が大きい場合、離調の逆数 ($|V_{dip}| \propto |\delta|^{-1}$) でポテンシャルが減少するが、基底状態からの減衰率は離調の逆数の二乗 ($\Gamma_g \propto |\delta|^{-2}$) で減少する。両方の量は電場強度に直接比例する。固定されたポテンシャル強度による原子雲加熱を導く非弾性散乱 Γ_g を減らすためには、離調とレーザー強度の両方をできるだけ大きくなるように選ぶ。したがって、実験では通常、加熱速度はレーザーの強度によって技術的に制限される。

この形式では、光学双極子ポテンシャルは原子の内部超微細状態に依存せず、全てに等しく結合することに注意することが重要である。したがって、内部超微細状態は独立した内部自由度として残る。

2.2 光学格子

この節では、極低温原子系の主要なツールの1つである「光学格子」を簡潔に説明し、凝縮系物理との関連性を述べる [2]。まず最初に1次元系で概念を明らかにする。古典的には、

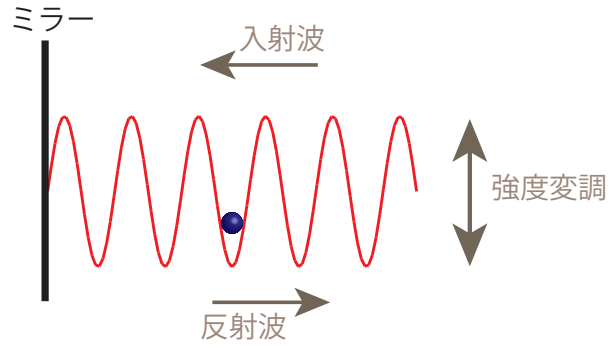


図 2.1: ミラーを利用してレーザーを反射することによる定在波の作成。入射波と反射波の重ね合わせにより、光学周波数での強度変調が生じる。原子は時間平均強度を感じるだけで、赤離調レーザーの格子の腹（高い平均強度）に引き付けられる。

レーザーの電場は単色波 $\mathbf{E}_1(\mathbf{r}, t) = E_0 \mathbf{e} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$ によって説明される。ここで、格子運動量 $k_L = |\mathbf{k}|$ は、 $k_L = 2\pi/\lambda_L$ によってレーザーの波長 λ_L に関係している。光学格子では、図 2.1 で示すようにミラーで反射させるか、代わりに 1 つ目とは逆伝播のレーザー $\mathbf{E}_2(\mathbf{r}, t) = E_0 \mathbf{e} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \omega t)$ が用いられ、定在波

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_1(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}_2(\mathbf{r}, t) = 2E_0 \mathbf{e} \cos(\omega t) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (2.2.1)$$

となる。

AC-Stark 効果 (2.1 節) により、原子は $|\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)|^2$ に比例するポテンシャルを感じ、赤 (青) の離調した格子レーザーの強度最大 (最小) に引き寄せられる。定在波の時間平均強度分布の格子間隔 a は、レーザー波長の半分 $a = \lambda_L/2 = \pi/k_L$ である。電場 (式 (2.2.1)) から生じる光学ポテンシャル (式 (2.1.9)) も定在空間波であり、光学場 ω の周波数で時間的に変調される。 ω は通常、原子運動の逆時間スケールよりも 10 桁大きいので、原子は時間平均された光学ポテンシャルしか感じない。3次元 (3つの空間次元) において 1次元系の実験を行うためには、系の次元を減らすために、残りの 2つの空間次元に非常に強い閉じ込めを課し、2つの空間次元に沿った単一粒子基底状態を超える様な任意の励起を効果的に凍結する。また、 z 方向の分極が x, y 方向の分極と常に直交する場合 (2次元系)、 $x - y$ 平面のポテンシャルは次のように記述できる。

$$V(x, y) = -V_{lat} \left(\cos^2(k_L x) + \cos^2(k_L y) + 2\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2 \cos(k_L x) \cos(k_L y) \right) \quad (2.2.2)$$

光学格子は、赤色または青色の離調レーザーを使用して作成でき、原子はそれぞれ高強度または低強度で空間領域に引き付けられる。後者の場合、原子が反発して光学ビームを完全に離れることがエネルギー的に有利であるため、追加のトラップが必要である。したがって、赤の離調した格子の場合、原子はガウストラップポテンシャルによってビームの断面に自動的にトラップされる。これは、調和トラップポテンシャル (2次のオーダー) として近似される。また、図 2.2 に現実の物質 (金属) 中の電子の感じるポテンシャルと光学格子中の原子の感じるポテンシャルの対応図を図示する [23]。

格子系の固体状態に対する光学格子の主な利点は、パラメータの高精度な制御や次元の変更が可能にある点にある (図 2.3)。これは、実験のある段階で追加のレーザービームをオンにすることもできるため実現可能となる。また、異なるビーム間の周波数差を適切に制御し、個々の格子ビームの強度等を時間的に変調することもできる。異なる幾何学的レーザー設定を使用すると、異なる格子形状を実現できる。最も一般的な光学格子形状である立方 (正方) 格

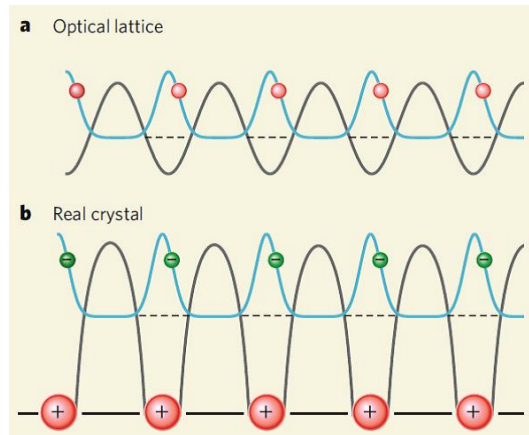


図 2.2: 光学格子中の極低温原子は、金属などの固体結晶中の電子の動きをシミュレートできる。光学格子 (a) では、原子はレーザービームで作成されたポテンシャル (灰色) に閉じ込められる。原子の波動関数 (青) は、実際の金属中の価電子の波動関数 (b) に対応している。金属中 (b) での周期ポテンシャルは、金属を形成する電子 (-) とイオン (+) 間の引力によって引き起こされる。粒子の運動と相互作用は、極低温原子でも原子でも、物質の物理的性質を決定する。[23] より引用。

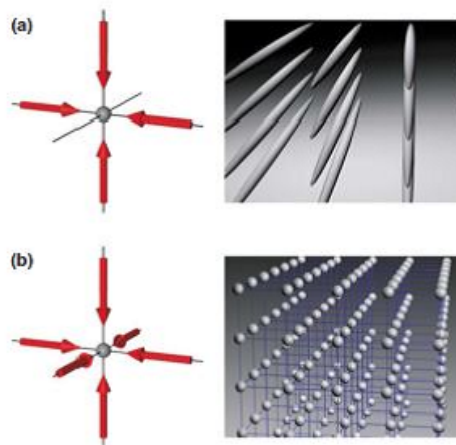


図 2.3: (a) 2次元、(b) 3次元における光学格子の図。2次元の光学格子の場合、原子は閉じ込められた1次元のポテンシャルチューブの配列に閉じ込められる。一方、3次元の光学格子は、各格子サイトに閉じ込められた調和振動子ポテンシャルの3次元単純立方配列によって近似できる。[2] より引用。

子とは別に、六角形 [24,25]、三角形 [26]、カゴメ [27]、ハニカム格子 [28] が実現された。近年、さらに有効的な磁気ゲージ場を光学格子の中性原子系に追加することで大きな進歩があり、これまでにいくつかの異なるアプローチが実験的に実装が成功してきた [29,30]。

2.3 Bose-Hubbard モデル

光学格子中の冷却原子系（ボース粒子系）の振る舞いを記述するモデルは、Bose-Hubbard (BH) モデルと呼ばれる。ここでは、BH モデルの導出や詳細について述べていく。最もシンプルな BH モデルの状態相として Mott 絶縁体 (MI) 相と超流動 (SF) 相が存在する。この状態相の詳細は後述するが、簡単に説明をすると、

- SF 状態は、系全体の位相が揃っており長距離コヒーレンスを持っている。一方、各格子サイトの粒子が不確定性を持ち揺らいでいる。簡単な図を図 2.4 に図示した。

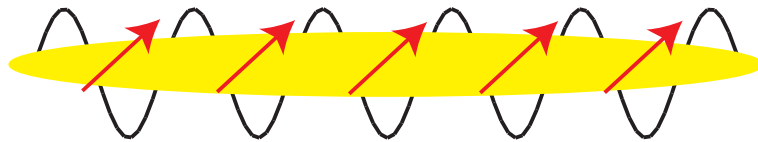


図 2.4: SF 状態の簡略図。黄色は粒子を表し、赤い矢印は位相を表す。粒子が確定していない一方、位相は揃っている様子が分かる。

- MI 状態は、系の位相が不確定性を持ち揺らいでいる。一方、各格子サイトに粒子が整数個存在している。簡単な図を図 2.5 に図示した。

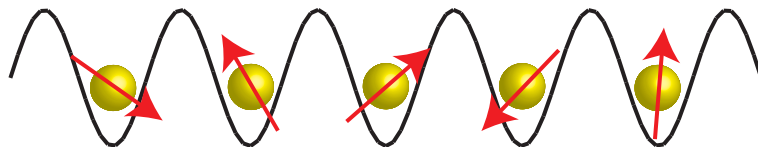


図 2.5: MI 状態の簡略図。黄色は粒子を表し、赤い矢印は位相を表す。粒子が確定している一方、位相は揃っていない様子が分かる。

2002 年に、Greiner らは強相関係の SF 相から MI 相への相転移を観測した [17]。一方、電子間の強い相関関係の効果は、1930 年代後半に観察された。一部の金属は、伝導性があるバンド構造にも関わらず、不十分な伝導または絶縁性さえ示すことが分かった [31]。これは、電子間のクーロン力が強いために、電子が全く動かないことで説明ができると考えられていた [32]。これにより、以下の式で与えられた第二量子化形式の Hubbard モデル [33] が定式化された。

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} - \mu \sum_i (n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}) \quad (2.3.1)$$

このモデルは、固体中の簡単な描写であるが、MI 相から金属への転移を正しく表すことができる。\$c_{i,\sigma}\$ はサイト \$i\$ でのスピン \$\sigma\$ の電子の消滅演算子を表し、\$n_{i,\uparrow} = c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\uparrow}\$ である。2つ

の自由度のみを考慮する。電子は、トンネルエネルギー J で格子サイト i から隣接サイト j に移動でき、反対のスピン σ を持つ2つの電子が同じ格子サイトを占有した時、相互作用エネルギー U によって斥力を受ける。最後の項は、化学ポテンシャル μ を調整することにより、総粒子数を制御する。

1989年に、格子内のボソンを記述する同様のモデルがFisherらによって提案された [34]。そのモデルは、BHモデルとして知られており、第二量子化形式でハミルトニアンは、

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^\dagger b_j + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \mu \sum_i n_i \quad (2.3.2)$$

b_i はサイト i におけるボソンの消滅演算子で、 $n_i = b_i^\dagger b_i$ である。このモデルは、 $T = 0$ でのボソンについて描写し、SFからMI相への相転移も示している。これは、相転移が熱揺らぎではなく量子揺らぎによって引き起こされることを意味する。したがって、SF相からMI相への相転移は量子相転移に分類される [35]。

Jakshらは、このハミルトニアンが光学格子内の極低温ボソンによって非常に正確にシミュレートできることに気が付いた [36]。光学格子はレーザービームの干渉により、定在波を作り、周期的なポテンシャルを格子とみなすような量子シミュレータである (2.2節参照)。彼らは、ボソンを個々の格子サイトに閉じ込める光学格子ポテンシャル V_0 と、相互作用するトラップポテンシャル V_T にトラップされたボソンを適用した。原子は極低温なので、原子間の相互作用は主に散乱長 a によって決定されるs波散乱過程で与えられる。多体ハミルトニアンは、

$$H = \int d^3x \psi^\dagger(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_0(\mathbf{x}) + V_{\text{off}}(\mathbf{x}) \right) \psi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \int d^3x \psi^\dagger(\mathbf{x}) \psi^\dagger(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \quad (2.3.3)$$

である。局所的なワニア基底でボソン場演算子を展開すると、

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_i \omega(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) b_i \quad (2.3.4)$$

系に励起が存在しないという仮定の下で、式 (2.3.2) のBHハミルトニアンを得る。この時、相互作用の強さ U は、

$$U = \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \int d^3x |\omega(\mathbf{x})|^4 \quad (2.3.5)$$

と得られ、サイト i と j 間のホッピング行列成分は、

$$J = - \int d^3x \omega^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_0(\mathbf{x}) \right] \omega(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) \quad (2.3.6)$$

である。各格子サイトのエネルギーオフセット $\mu_i = \int d^3x V_{\text{off}}(\mathbf{x}) |\omega(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)|^2$ は一般的に空間的に変化するが、均一な格子の場合は、そのサイト依存性は消滅する。次に、 $\mu_i = \mu$ を設定してインデックス i を消して、式 (2.3.2) のハミルトニアンになる。

光学格子内の極低温ボソンで式 (2.3.2) をシミュレーションする主な利点は、実験の重要なパラメータをすべて制御できるところである。原子がレーザー光の電磁場 $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} + c.c.$ と相互作用すると、双極子モーメント $\mathbf{p}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} + c.c.$ が誘導される。振幅 $\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}$

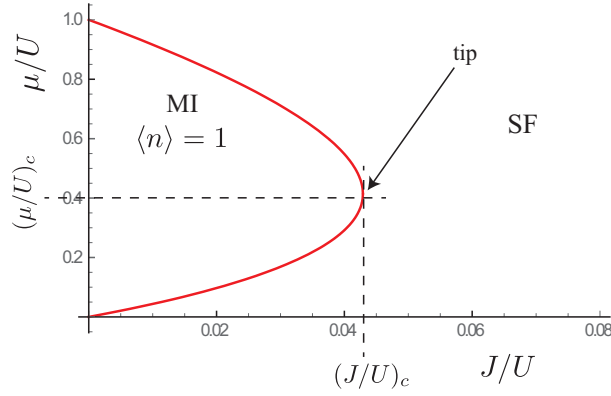


図 2.6: $V = 0$ における MI 相と SF 相の相図。MI 相内では、各サイトに粒子が 1 個ずつ存在しており、位相の揺らぎを有する。また、それ以外の SF 相では、粒子数は揺らぎを持つ代わりに位相のコヒーレントを持つ。これは粒子数と位相の不確定性関係に起因する。ここで、 $(J/U)_c$ と $(\mu/U)_c$ の交差する点を tip と呼ぶことにする。

は原子の分極率 α に依存する。これは、電場内の誘導双極子モーメントの相互作用ポテンシャル

$$V_{dip} = -\frac{1}{2\epsilon_0 c} \text{Re}(\alpha) I \quad (2.3.7)$$

につながり、 $I = 2\epsilon_0 c |E(\mathbf{r})|^2$ は光学格子のレーザービームの強度である [37]。つまり、レーザービームの強度を変更することによって、BH ハミルトニアン のトンネルエネルギー J とオンサイトエネルギー U の両方を直接制御できることを意味する。さらに、Feshbach 共鳴を使用することにより、相互作用強度 U だけを制御することもできる [2]。

$J/U \rightarrow 0$ の極限では、全ての粒子が局在し、 N 粒子と M サイトを持つ格子にあり、全てのサイトは、 $g = \langle n_i \rangle = N/M$ 粒子で占められている。filling は、整数である filling factor g で示される。この粒子の局在化と $\partial \langle n_i \rangle / \partial \mu = 0$ で表される非圧縮性は、MI 状態と定義し、基底状態は

$$|\Psi_{\text{MI}}\rangle = \prod_{i=1}^M \frac{(b_i^\dagger)^g}{\sqrt{g!}} |0\rangle \quad (2.3.8)$$

で与えられる。局所生成演算子 b_i^\dagger は粒子の無い真空状態 $|0\rangle$ に g 回作用する。この相では、スペクトルは基底状態のエネルギーと第一励起状態エネルギーのギャップを示している。また、この相では、図 2.5 にあるように、各格子サイトの粒子数は確定しているが、位相の不確定性を持つ。

反対に、 $J/U \rightarrow \infty$ の極限では、相互作用エネルギーは、トンネルエネルギーと比較して非常に小さく、粒子の非局在化につながる。全ての粒子は $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ で基底状態

$$|\Psi_{\text{SF}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{i=1}^M b_i^\dagger \right)^N |0\rangle \quad (2.3.9)$$

に凝縮され、SF 状態と定義する。この相では、図 2.4 にあるように各格子サイトに粒子の不確定性があるが、長距離の位相コヒーレンスが現れる [38]。

これらの 2 つの相状態の間には、図 2.6 に示すように、相境界がある。2 つの相の相境界線は Mott lobe と呼ばれる。Mott lobe の内部は、MI 状態となっており、それ以外の外側は、SF 状態である。各 Mott lobe について、臨界ホッピング $(J/U)_c$ と臨界化学ポテンシャル $(\mu/U)_c$ は、系がまだ MI 状態である J/U の最大値によって定義される (tip と呼ぶ)。

2.4 平均場近似手法

一粒子量子力学的問題とは対照的に、多粒子ハミルトニアン of 厳密な対角化は、系のサイズに伴いヒルベルト空間が指数関数的に増加するため、現実的な系のサイズと粒子数を考える時、計算が不可能となる。近年、1次元系の場合、相互作用する多体系を計算するための数値的手法の開発が大幅に進歩した。密度行列繰り込み群 (DMRG) は、本質的に、関心のある時間スケールについて、静的または動的両方のほとんどの問題を数値的に解くことができる。一方、高次元系では、時間依存の有無に関わらず、任意のボソンまたはフェルミオンの問題を計算するための同等の手法は存在しない。ほとんどの場合、平均場近似などの近似が必要である。ここでは、光学格子内の相互作用するボソン (BH モデル) に対する Static Gutzwiller (GW) 平均場近似を簡潔に述べていく。その後、系が時間変化するような場合に移り、ボソンにおける時間依存 Gutzwiller (t-GW) 法を導入する。

2.4.1 Static Bosonic Gutzwiller 法

この節では、ボソンの GW 平均場近似について述べていく。
ここでは、シンプルな BH モデル

$$H_{BH} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + H.c.) + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \mu \sum_i n_i \quad (2.4.1)$$

を考える。

まず、GW 法では、波動関数を粒子数基底を用いた直積状態 (GW 波動関数)

$$|\Psi_{GW}\rangle = \prod_{i=1}^L \sum_{n=0}^{n_c} f_n^i |n\rangle_i \quad (2.4.2)$$

として定義する。ここで、 L は全サイト数、 n_c はサイトの最大粒子占有数を表す。数値計算上では、粒子数基底は十分大きな占有数 n_c によって cut off される。 $|n\rangle_i$ は、格子サイト i での Fock 状態 (粒子数基底) であり、複素数 f_n^i は期待値

$$\langle \Psi_{GW} | H_{BH} | \Psi_{GW} \rangle \quad (2.4.3)$$

を最小にするように決まる変分パラメータである。エネルギーの最小値は、

$$\sum_{\langle j \rangle_i} -J_{ij} [\sqrt{n+1} f_{n+1}^i \Psi_j^* + \sqrt{n} f_{n-1}^i \Psi_j] + n \left[\frac{U}{2} (n+1) - \mu \right] f_n^i = 0 \quad (2.4.4)$$

で得られる。ここで、 $\sum_{\langle j \rangle_i}$ はサイト i の最近接サイト j の全ての足し合わせを表し、 $f_{-1}^i = f_{n_c+1}^i = 0$ とする。平均場 Ψ_i は、

$$\Psi_i = \langle \hat{a}_i \rangle = \sum_{n=1}^{n_c} \sqrt{n} f_{n-1}^{i*} f_n^i \quad (2.4.5)$$

と定義し、この Ψ_i は本研究でオーダーパラメータとして用いる。式 (2.4.5) を解くことで、式 (2.4.2) での全ての係数 f_n^i を得る。このようにして時間発展での初期状態を決定できる。

式 (2.4.5) を解くことと等価な別のアプローチを使うことができる。以下の様な平均場 decoupled ハミルトニアン [40] の基底状態を探す方法である。

$$\hat{H}^{\text{MF}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{a}_i^\dagger \Psi_j + \Psi_i^* \hat{a}_i - \Psi_i^* \Psi_j) + H.c. \quad (2.4.6)$$

$$+ \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}(\hat{n} - 1) - \sum_i \mu \hat{n}_i$$

この平均場 decoupled ハミルトニアンはサイト分断平均場法を BH ハミルトニアンに用いて得られる。より詳細は参考文献 [36] にあり、ここでも参考になっている。まず、BH ハミルトニアンでの生成消滅演算子は平均場項と微小揺らぎ項に分離することができる。

$$\begin{aligned} \hat{a}_j &= \langle \hat{a}_j \rangle + (\hat{a}_j - \langle \hat{a}_j \rangle) \\ \hat{a}_i^\dagger &= \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle + (\hat{a}_i^\dagger - \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle) \end{aligned} \quad (2.4.7)$$

これらを用いると、BH ハミルトニアンのホッピング項は、

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j = \langle \hat{a}_j \rangle \hat{a}_i^\dagger + \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \hat{a}_j - \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \langle \hat{a}_j \rangle + (\hat{a}_i^\dagger - \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle) (\hat{a}_j - \langle \hat{a}_j \rangle) \quad (2.4.8)$$

となる。式 (2.4.8) の最後の項（揺らぎの 2 次の項）は平均場近似では無視される。高次元の極限では、非相互作用の極限 $U/J \rightarrow 0$ と同様、平均場理論での結果は厳密なものになる。これを用いると BH ハミルトニアンはサイト i にのみ作用する平均場 decoupled ハミルトニアン（式 (2.4.6)）を得ることができる。ここで、 $\Psi_i = \langle \hat{a}_i \rangle$ は消滅演算子の期待値を表す。そして、この期待値は系のオーダーパラメータとして解釈される。

この decoupled ハミルトニアンの基底状態は、式 (2.4.2) との直積状態で書かれる。係数 f_n^i の最適化された組は、式 (2.4.6) のハミルトニアンの固有ベクトル成分と関連がある。つまり、自己無撞着に決めることができる。数値計算では、この条件は以下である。非ゼロの任意の組 Ψ_i^0 を使用して、 f_n^i の組を取得するために各サイトに対して対角化された decoupled ハミルトニアンの組を構築する。得られた f_n^i から、 Ψ_i^{new} の組を式 (2.4.5) により計算する。もし、この新しい組の成分が前の組 Ψ_i^0 と一定の誤差内で等しければ、この計算は終了する。もし、異なる場合、 $\Psi_i^0 = \Psi_i^{\text{new}}$ とし、decoupled ハミルトニアンの新しい組を構築し、再び対角化し新しい Ψ_i^{new} を探す手順を誤差内で等しくなるまで繰り返す。式 (2.4.4) と式 (2.4.6) の両方とも本質的な結果を得る。

2.4.2 Time-Dependent Bosonic Gutzwiller 法

前節では、BH モデルでの Static GW 法について説明をしてきた。しかし、Gutzwiller 法は、時間依存問題を扱うため拡張することもできる。ここでは、時間依存 Gross-Pitaevskii 方程式を超えて相互作用するボソンドイナミクスを扱うことができる、シンプルではあるが非常に強力な手法を構築する [41]。この節では、この手法を簡単に説明し、GW 変分作用を最小化することで、時間依存の運動方程式を導出する。時間依存の方程式はシュレディンガー方程式を仮定することで得られる。ここでの時間発展は、時間に依存しない場合にエネルギーを最小化して基底状態を決めたことと同様に、変分作用を最小化することで時間発展方程式を得る。

時間依存系に対する bosonic GW 形式は、局所格子状態の最も一般的な形式の直積状態

$$|\Psi_{\text{GW}}(t)\rangle = \prod_{i=1}^L \sum_{n=0}^{n_c} f_n^i(t) |n\rangle_i \quad (2.4.9)$$

である。\$f_n^i(t)\$ はここでは、時間依存する確率振幅である。つまり、Static GW 法から、

$$\begin{aligned} f_n^i &\rightarrow f_n^i(t) \\ |\Psi_{\text{GW}}\rangle &\rightarrow |\Psi_{\text{GW}}(t)\rangle \end{aligned} \quad (2.4.10)$$

と変更する。時間依存変分原理 [73, 88] を用いて \$|\Psi_{\text{GW}}(t)\rangle\$ の時間発展を計算する。つまり、期待値を最小化するように計算する。

$$\langle \Psi_{\text{GW}}(t) | i\hbar\partial_t - \hat{H}^{\text{MF}} | \Psi_{\text{GW}}(t) \rangle = 0 \quad (2.4.11)$$

そして、以下の様な時間発展方程式を得る。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f_n^i(t) = -J \sum_{j \in \text{iNN}} \left[\sqrt{n+1}f_{n+1}^i\Psi_j^* + \sqrt{n}f_{n-1}^i\Psi_j \right] + n \left[\frac{U}{2}(n-1) - \mu \right] f_n^i \quad (2.4.12)$$

4 次のルンゲ・クッタ法を用いて \$L \times (n_c + 1)\$ 個の差分方程式を数値的に解く。ここで重要なこととして、時間発展中は波動関数の規格化や系の平均粒子数、エネルギーは保存される。

t-GW 近似内の時間発展下では、平均粒子数は保存される。これは、総粒子数期待値 \$N(0) = \langle \Psi_{\text{GW}}(0) | \hat{N} | \Psi_{\text{GW}}(0) \rangle\$ を持つ任意の初期 GW 状態 \$|\Psi_{\text{GW}}(0)\rangle\$ を考慮することで確認することができる。時間発展演算子を線形化し、時間ステップ \$dt\$ 後の状態は

$$|\Psi_{\text{GW}}(dt)\rangle = |\Psi_{\text{GW}}(0)\rangle - idt\hat{H}|\Psi_{\text{GW}}(0)\rangle \quad (2.4.13)$$

となり、その時の粒子数期待値は

$$\begin{aligned} N(dt) &= \langle \Psi_{\text{GW}}(dt) | \hat{N} | \Psi_{\text{GW}}(dt) \rangle \\ &= N(0) + idt\langle \Psi_{\text{GW}}(0) | [\hat{H}, \hat{N}] | \Psi_{\text{GW}}(0) \rangle + O(dt^2) \end{aligned} \quad (2.4.14)$$

となる。第二項の交換子は平均場近似レベルではゼロとなる。

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\text{GW}}(0) | [\hat{H}, \hat{N}] | \Psi_{\text{GW}}(0) \rangle &= \langle \Psi_{\text{GW}}(0) | [\hat{H}, a_i^\dagger a_i] | \Psi_{\text{GW}}(0) \rangle \\ &= \sum_{i,j} \Psi_j^* \langle \Psi_{\text{GW}}(0) | a_i | \Psi_{\text{GW}}(0) \rangle - \sum_{i,j} \Psi_j \langle \Psi_{\text{GW}}(0) | a_i^\dagger | \Psi_{\text{GW}}(0) \rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.4.15)$$

つまり、

$$N(dt) - N(0) = O(dt^2) \approx 0 \quad (2.4.16)$$

ここで、数値計算において \$dt \sim O(10^{-4})\$ (\$dt\$ = 時間刻み) なのでゼロに近づく。なので、時間発展中の平均粒子数は保存される。

第3章 相転移と Kibble-Zurek 機構

3.1 相転移

相転移とは、ある相から別の相に系の平衡状態を転移することで、その物理的特性のいくつかが大幅に変化する。相転移は、転移中の対象としている系の熱力学的特性に応じて、2つのクラスに分けることができる [43, 44]。

- 1次相転移：1次 (不連続な) 相転移は、相1から相2への相転移中の潜熱

$$l = T\Delta S = T(S_1 - S_2) \quad (3.1.1)$$

の吸収と放出によって定義される。温度 T は、潜熱の定義に従って相転移中には変化しない。エントロピー S は熱力学ポテンシャル (ここでは自由エネルギー \mathcal{F}) に

$$S = - \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial T} \right)_\eta \quad (3.1.2)$$

を介してつながっているため、1次導関数は臨界点で不連続性を示す。1次導関数のこの不連続性は、1次相転移という名前の由来でもある。比熱と磁化率も自由エネルギーにつながっているため、同様に臨界点で特異性を示す。外部場に対する自由エネルギーの導関数によって与えられるオーダーパラメータも不連続性を示す。典型的な例は、液相から気相への転移である。

- 2次相転移：2次 (連続な) 相転移は、1次導関数ではなく、より高い導関数で不連続性を示す。つまり、この相転移には潜熱は関与しない。連続な相転移は、不連続性を示す導関数の次数に応じて、さらに n 次の相転移に分けることができる。ただし、このいわゆる Ehrenfest 分類は、全ての相転移の説明には十分ではない。例えば、対数的発散を有する多くのシステムでは、すなわち、臨界指数がゼロに等しいシステムでは、Ehrenfest 分類において考慮されないことが知られている。よく知られた例の一つは、2次元の Ising モデルであり、臨界指数 $\alpha = 0$ を持つ比熱は対数発散を示す。2次相転移の例としては、常磁性相から強磁性相への相転移、および Mott 絶縁体相から超流動相への相転移がある。

この章では、主に臨界点を介して、制御パラメータと呼ばれる熱力学的 (量子力学的) 変数の変化によって相転移が駆動される場合の2次 (連続的な) 相転移に焦点を当てる。

静的な特徴の例として強磁性転移を考えてみる。制御パラメータは温度 T であり、臨界点はキュリー温度 T_c である。 T_c を超えると、系には正味の磁化が存在しないため、磁氣的に等方的になる。反対に、低温では自発磁化が発生する。磁化ベクトルによって与えられる優位方向が選択されるため、元の対称性が破られる。臨界点より下の対称性が低い状態を記述するために、オーダーパラメータと呼ばれるパラメータを導入できる。オーダーパラメータ

は、臨界点より高温の対称状態ではゼロであるが、秩序を持つ対称性が破れた状態では有限値を取る。強磁性転移の例に関して、オーダーパラメータは磁化であり、これは系の磁気秩序の尺度を表す。オーダーパラメータの統計的変動は、2次相転移において重要な役割を果たす。量子相転移の場合、これらの変動はゼロ温度でも存在する可能性があるが、ここでは説明のため、有限温度で発生し熱揺らぎによって特徴づけられる古典的な転移に焦点を当てる。このような揺らぎが関連する長さスケールは、相関長 ξ で書かれる。転移時に相関長は発散する。これは、臨界点を下回ると系全体でオーダーパラメータが有限かつ均一になるという事実を反映している。強磁性転移の例を考えると、臨界温度での相関長の振る舞いは、次のようなベキ則スケーリングによって記述される。

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu} \quad (3.1.3)$$

ξ の発散は、強磁性体の比熱 C 、磁化 M 、磁化率 χ など、他の熱力学量の特異性に対応する。

$$\begin{aligned} C &\sim |T - T_c|^{-\alpha} \\ M &\sim |T - T_c|^\beta \\ \chi &\sim |T - T_c|^{-\gamma} \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

この記述は他の2次相転移に一般化でき、転移点での特異な熱力学的特性を記述するベキ則の指数 $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ は臨界指数と呼ばれる。制御パラメータの臨界値 T_c は特定の系の特性に依存するが、臨界指数は微視的詳細ではなく、転移の普遍性クラスによってのみ決定されることに注意が必要である。同じ普遍性クラスに属する連続相転移は、異なる種類の系であっても、同じスケーリング則によって記述される。

また、1次相転移や2次相転移以外の特殊な相転移も存在する。2次（連続な）相転移では、オーダーパラメータの対称性の破れを含む。それゆえ、秩序相から無秩序相へと変化する（もしくは無秩序相から秩序相）。しかしながら、Mermin-Wagner-Hohenbergの定理のため、有限温度の低次元系（1次元系や2次元系）では長距離秩序の存在は許されない。にも関わらず、2次元系では低温相へのBerezinskii-Kosterlitz-Thouless(BKT)転移 [43, 44]が存在する。低温相では、長距離にわたって揃っているわけではないが、急速に変化するわけでもなく、ゆっくりと変化するような、準長距離秩序が存在している。ここでは、オーダーパラメータの相関関数が代数的（ベキ乗の振る舞い）に減衰する。このような系の典型的な例として、2次元XYモデルがある。

BKT転移は低温相でのvortex形成の抑制によって特徴づけられる。一方、高温相では、vortex-antivortexペアの結びつきが解けてしまう。BKT転移温度は、自由エネルギー $F = E - TS$ におけるエネルギーとエントロピーの競合の結果、最小化する値によって決定される。また、 $(d+1)$ 次元古典系の分配関数と d 次元量子系の分配関数間の対応（古典-量子対応）のため、1次元Bose-Hubbard(BH)モデルではBKT転移が存在することが知られている [35, 45]。

3.2 臨界指数

古典的な（量子的な）相転移において最も重要な特徴のひとつは、臨界点で普遍的な振る舞いをする点である。モデルの全ての微視的詳細を含める必要はなく、相転移の多くの重要な特徴は、転移までの距離とともに代数的にスケーリングする。このようなスケーリング解析を実行できることは、古典（量子）相転移の研究における最も重要な洞察の1つであ

る [35, 46]。相転移を特徴づけるものとして、臨界点での物理量の発散が挙げられる。このようなスケーリング解析の議論は、2次相転移の特殊なケースに限定される。つまり、基底状態エネルギーの不連続性が2次導関数にのみ現れる場合である。Ising モデルと XX チェーンにおいて同様のスケーリング解析で記述できるが、ここでは、BH モデルに焦点を当てている。そのために、BH モデルのパラメータ $g = U/J$ を導入する。 $g < g_c$ の場合、系はギャップレスな超流動相にある。臨界点での基底状態の相関長 ξ は、

$$\xi \propto |g - g_c|^{-\nu} \quad (3.2.1)$$

とベキ則スケーリングで記述できる。指数 ν は、相関長の臨界点における発散を特徴付けるので、「相関長臨界指数」と呼ばれる。また、系に外部から摂動を加えた時、基底状態への緩和（準粒子の減衰）の度合いを表すパラメータとして緩和時間 τ がある。緩和時間 τ は臨界点において

$$\tau \propto |g - g_c|^{-\nu z} = \xi^z \quad (3.2.2)$$

とパラメータ g に関して発散する。指数 z は、動的現象に関して特徴づけるので、「動的臨界指数」と呼ばれる。臨界点において系が基底状態へ到達するには、無限の時間がかかる。これは相転移の臨界現象の1つであり、「臨界緩和」と呼ばれている。これらから分かるように、臨界指数は発散の度合いを表している。

上記のスケーリング解析は BH モデルにおいてもうまく機能する。 d 次元の BH モデルの普遍クラスは、 $d+1$ 次元 XY モデルのものと同じであるため [47]、今回は2次元 BH モデルと3次元 XY モデルが同じ普遍クラスに属する。3次元 XY モデルと平均場における相関長臨界指数 ν と動的臨界指数 z は、

	ν	z
3次元 XY	0.672	1
平均場	1/2	2

である。

3.3 動的量子相転移

量子相転移は、量子多体物理学に関連する最も興味深い現象の1つである。従来の相転移と同様に、外部パラメータが変化すると、系の振る舞いが大きく変化するという特徴がある。古典的な熱力学では、相転移は熱揺らぎによって駆動され、例えば、温度がキュリー温度を越えると、系は低温の強磁性相から常磁性相に変化する。

古典的な相を観測するには、大規模な系を考慮する必要がある。実際、厳密な数学的定義には、無限の系が必要である。したがって、相転移は真の多体現象であり、先験的にそれらの記述が非常に複雑であると予想することができる。この予想は確かに正しいが、古典的な相転移の多くの側面では、驚くほどシンプルなスケーリング則で非常にうまく捉えることができる。繰り込み群理論に基づいて、相転移を普遍性クラスに分離する臨界指数を計算することができる。相転移に関する系の重要な特徴を、これらの臨界指数を用いたシンプルなベキ則スケーリングにより捉えることが可能となる。

量子相転移でも、外部パラメータを変化させると、系の振る舞いが劇的に変化する。古典的な相転移とは対照的に、量子相転移は量子揺らぎによって駆動されるため、ゼロ温度でも起

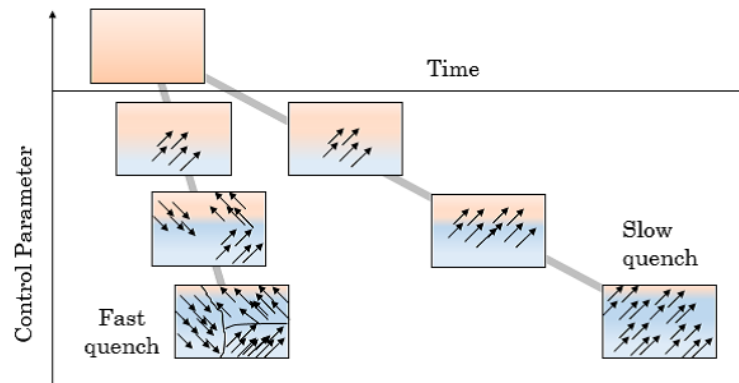


図 3.1: ボース気体を凝縮相への転移を起こすために冷却する。ゆっくり冷却した場合、系の位相は全体で揃ったものとなる。一方、冷却が速い場合、系全体で位相が揃う前に変化していくため、いくつかの位相の領域（ドメイン）が出現する。これは、系の緩和時間（平衡状態へかかる時間）がパラメータ（温度）変化に追いつかなくなるために起こる現象であり、Kibble-Zurek 機構と呼ばれる。

こる。古典的な相転移の場合と同様に、量子相転移の静的特性は今では比較的良好に理解されており、実験により広範囲の設定で上手く捉えることができている。本質的な複雑さにも関わらず、シンプルなスケール則の観点から、静的な結果を非常に正確に捉えることができることが知られている。

量子相転移の静的および動的な特徴を結ぶために、Kibble と Zurek は直観的で価値のある説明 (Kibble-Zurek 機構 (KZM)) を提案した [48–52]。これは、もともと古典的な相転移のために生み出された。KZM は、いくつかの実験で成功していることが証明されているが、その一般的な適用性と厳密な定式化は未解決の問題のままである。

まず、KZM の一般的な考えについて触れる。これまで、静的な系を検討してきた。静的な系では、転移は断熱的に発生して、系は制御パラメータを変化させながら各パラメータごとに平衡状態になる。一方、有限速度で制御パラメータを変化させて転移を起こす状況ではこの断熱的な記述は適用できない。系の動的な特性を説明するために、緩和時間と呼ばれる特徴量を導入する。これは、系が平衡状態へと緩和する時間を表す。相関長と同様に、緩和時間 τ はべき則として制御パラメータにスケールし、2 次相転移の臨界点で発散する。

$$\tau \sim |g - g_c|^{-\nu z} \quad (3.3.1)$$

臨界的な slow down、つまり緩和時間の発散の結果として、実験における相転移は常に非断熱領域で転移する。さらに、オーダーパラメータの情報は、系の特性速度である因果律によって課される制限よりも速く伝播できないことを考慮しなければならない。したがって、対称性が破られると、オーダーパラメータは系の異なる領域で異なるランダムな値を取ることができる。図 3.1 に図示されているように、これは独立した位相ドメインの形成を引き起こす可能性があり、その典型的なサイズは転移点近くの相関長に関係している。

緩和時の様々な相の混合の結果として、転移が起こった後、ドメイン境界にトポロジカル欠陥が形成される場合がある。

この機構は、宇宙論において Kibble によって議論された [48, 49]。特に、Kibble は、ビッグバン後の宇宙の急速な膨張と冷却の間に生じた可能性のある自発的な対称性の破れについての説明を提案し、宇宙異方性の形成につながった。

Kibble の概念は、その後、Zurek によって凝縮系の 2 次相転移に拡張され、実験的に実現可能な状況を提案した [50–52]。この一般的な描像は、KZM (Kibble-Zurek 機構) と呼ばれる。

相転移点を横切る速度が、より速いクエンチではより小さな領域の形成を予想し、次元解析により、クエンチ後に形成されるトポロジカル欠陥密度のスケーリング則を予想する。次に、KZ理論の最も重要な結果について説明していく。

3.4 古典的 Kibble-Zurek 機構

古典的な2次相転移は、温度パラメータ T を変化させ、臨界温度 T_c を越えることで引き起こされる。2次相転移は、それぞれの相において一意に決まる物理量であるオーダーパラメータの変化によって特徴づけられる。多くの相転移では、系が臨界温度 T_c より高温の場合、対称性を持つ相（無秩序相）が実現している。ここでは、オーダーパラメータはゼロであり、相は定義しているハミルトニアンに対称性を持っている。系が臨界温度 T_c より低温の場合、この対称性は自発的に破れ、オーダーパラメータは有限の値を取る。理想的な平衡状態の場合、 T_c を越える転移は断熱的 (adiabatic) に起こり、低温相でのオーダーパラメータの値はどこでも一定となり、相は空間的に一様となる。しかしながら、転移が有限速度で駆動された場合、系全体に広がるオーダーパラメータの情報は限られた時間しか伝わらない。その結果、相転移を終えた系は自発的に破れた相のドメインで構成されることになる。ここで、それぞれのドメインでは、オーダーパラメータの値が一定であるが、ドメイン間は異なる状態となっている。ドメインの平均サイズは、転移レートに依存しており、転移が速ければ速いほどドメインは小さくなる。

これ以降の計算で、 ϵ は臨界点からの相対距離（無次元距離）として、

$$\epsilon = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (3.4.1)$$

と定義する。相関長 ξ は、緩和時間を τ として、温度が T_c に近づくにつれて代数的に成長する。

$$\begin{aligned} \xi &\sim |\epsilon|^{-\nu} \\ \tau &\sim \xi^z = |\epsilon|^{-\nu z} \end{aligned} \quad (3.4.2)$$

上記の式は、臨界指数 ν と z を定義している。臨界点における相関長は、無限大になり、系はスケールを持たなくなる。

系は、臨界点から遠く離れている (T_c より高温もしくは低温) 時、緩和レートは相対転移レート

$$\text{transition rate} = \left| \frac{1}{\epsilon} \frac{d\epsilon}{dt} \right| \quad (3.4.3)$$

に比べて、とても大きくなる。そのため、系は平衡状態へと向かうのに十分な時間を有し、相関長は平衡状態時の値に等しくなる。つまり、系は断熱 (adiabatic) 変化していることを意味する。一方、臨界温度 T_c に近いと状況は異なる。転移レートが緩和レートに比べて非常に大きく、相関が温度 T の変化に追いつかなくなる。この領域では、相転移のダイナミクスのメカニズムは原理的にとても複雑なものである。しかしながら、多くは adiabatic-frozen-adiabatic 近似と呼ばれるシンプルな近似で予想される (adiabatic-impulse-adiabatic 近似とも呼ばれる)。転移レートが緩和レートよりも大きい場合、系の発展を "frozen" として想定し、緩和レートが転移レートよりも大きい場合、系の発展を "adiabatic" と想定する。 $\hat{\epsilon}(= \epsilon(\hat{t}))$ では、2つのレートが同等である場合、系は一方の領域から他方の領域に移行する。それゆえ、系

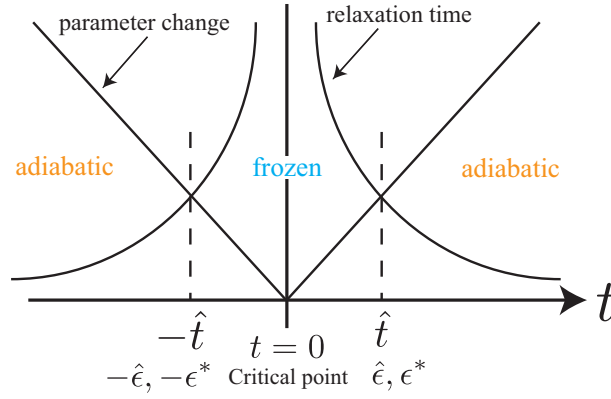


図 3.2: 2次相転移における adiabatic-frozen-adiabatic 近似の説明図。黒線が緩和時間 $\tau \sim |\epsilon|^{-\nu z}$ 、赤線が転移レートの逆数 $|\epsilon/\dot{\epsilon}|$ （臨界点からの無次元距離 ϵ の関数）。臨界点 $\epsilon = 0$ では、相関長 ξ や緩和時間 τ の発散で特徴づけられる。複雑な相転移ダイナミクスは2つの adiabatic 領域とそれに囲まれた frozen 領域に近似できる。frozen 領域では、系のダイナミクスは凍結され、それゆえ、系は無秩序相から秩序相へのクエンチが起こる。adiabatic 領域と frozen 領域の境界、つまり、緩和時間と転移レートの逆数が等しい時刻は \hat{t} と $-\hat{t}$ と呼ばれる。KZM ではこれらの時刻において、特徴的なスケールング則が予想されている。[53, 54] 等を参考。

が冷却されると、系の発展は $\hat{\epsilon}$ まで断熱的になる。そこで、相関長は次の境界の $-\hat{\epsilon}$ まで凍結し、系の発展は再び断熱的になる。adiabatic-frozen-adiabatic 近似を図 3.2 に図示している。 $\epsilon(t)$ の変化を時間に関して線形変化

$$\epsilon(t) \approx -\frac{t}{\tau_Q} \quad (3.4.4)$$

と仮定する。ここで、 τ_Q は「クエンチ時間」と定義し、相転移にかかる時間を表す。frozen-adiabatic 移行が発生するのは、

$$\left| \frac{1}{\epsilon} \frac{d\epsilon}{dt} \right| \sim \tau^{-1} \quad (3.4.5)$$

の場合である。ここで、 τ^{-1} は緩和レートである。それゆえ、 $t = \hat{t}$ において

$$\begin{aligned} \hat{t} &\sim \tau = |\dot{\epsilon}|^{-\nu z} \\ &\rightarrow \hat{t} \sim \tau_Q^{\frac{\nu z}{1+\nu z}} \end{aligned} \quad (3.4.6)$$

であり、式 (3.4.4) において $t = \hat{t}$ とすると、

$$\hat{\epsilon} \sim -\frac{\hat{t}}{\tau_Q} \sim -\tau_Q^{\frac{-1}{1+\nu z}} \quad (3.4.7)$$

となる。ドメインの平均サイズは $t = \hat{t}$ での平衡相関長

$$\hat{\xi} \sim |\dot{\epsilon}|^{-\nu} = \tau_Q^{\frac{\nu}{1+\nu z}} \quad (3.4.8)$$

によって評価できる。また、転移後のトポロジカル欠陥密度はドメインの平均サイズ $\hat{\xi}$ で特徴づけられる。つまり、トポロジカル欠陥密度 N_v は、

$$N_v \sim \frac{\hat{\xi}^d}{\hat{\xi}^D} \sim \tau_Q^{-(D-d)\frac{\nu}{1+\nu z}} \quad (3.4.9)$$

ここで、 D と d はそれぞれ空間とトポロジカル欠陥の次元を表し、例えば、3次元での渦糸は $D = 3, d = 1$ 、2次元での vortex は $D = 2, d = 0$ である。このトポロジカル欠陥は非常に強固で安定で、KZM を調べる際に非常に役に立つものである。KZM は、2次相転移でのダイナミクスの普遍的理論であり、その応用は低温 BEC から高エネルギー物理までにわたる。しかし、ゼロ温度量子系は明確に解明されていないのが現状である。古典的な相転移との最も大きな違いとしては、熱揺らぎではなく量子揺らぎによって相転移が引き起こされる点がある。次の節では、スケーリング則が形式的には同じであるが、根本的な物理学が異なる量子系（ゼロ温度）での KZM について説明する。

3.5 量子的 Kibble-Zurek 機構

系が無秩序相（対称相）から秩序相（対称性の破れた相）への連続的な相転移（2次相転移）を受けると、転移レートに依存して、新しい相に特徴的なサイズと密度を持つ欠陥が生じることが観測される。この様な励起は、臨界点での緩和時間の発散（臨界減速として知られる現象）が相境界を横切る断熱過程を妨げるために発生する [35]。この節では、古典系と類似するような、量子相転移を有限速度で行った後の、トポロジカル欠陥生成のスケーリング則について予想をする量子 KZM について紹介する。具体的には、KZM はトポロジカル励起（欠陥）密度と相関長のベキ則を転移レートの関数として予測するが、他の物理量のスケーリング則は次元分析によって導き出すことができる。この節で説明する KZM は、系が2次相転移間での相転移を起こす場合である。これは、BH モデルにおける Mott 絶縁体 (MI) 相から超流動 (SF) 相への相転移など、他の量子相転移にも拡張ができる。

臨界現象によると、系が臨界点に近づくと、緩和時間 τ_0 とオーダーパラメータの相関長 ξ は

$$\begin{aligned}\tau_0 &\sim |\epsilon|^{-\nu z} \\ \xi &\sim |\epsilon|^{-\nu}\end{aligned}\tag{3.5.1}$$

と増加する。ここで、

$$\epsilon = (g - g_c)/g_c\tag{3.5.2}$$

は、臨界点 g_c から調整パラメータ g の距離を表す無次元パラメータである。 ν と z はそれぞれ相関長臨界指数と動的臨界指数である。 ϵ がゼロに近づくと τ_0 が発散するため、系のダイナミクスは臨界点近くで凍結する。したがって、系が無秩序相から開始すると、新しい秩序相のドメインで構成されるモザイクの様な状態が発生する。これは古典的な場合と同じ理由である。各ドメインのオーダーパラメータの方向はほぼ一定だが、異なるドメイン間は無相関である。時間経過とともに、系は臨界点を通過する間、この Frozen 状態にとどまると予想され、緩和時間 τ_0 が有限値に減少するまでダイナミクスは再開しない。ダイナミクスが再開すると、系は励起状態から時間発展を開始する。このフレームワークは、adiabatic-frozen-adiabatic 近似と呼ばれており、図 3.2 に図示した。

KZM は相対転移レート $|\epsilon^{-1}d\epsilon/dt|$ と緩和レート $\tau_0^{-1} \sim |\epsilon|^{\nu z}$ が等しい場合、つまり、

$$\left| \frac{1}{\epsilon} \frac{d\epsilon}{dt} \right| \sim |\epsilon|^{\nu z}\tag{3.5.3}$$

の場合、adiabatic 領域から frozen 領域への移行が発生すると仮定する。式 (3.5.3) に時間依存性を導入するために、調整パラメータ ϵ は時間の連続関数であり、 $t = 0$ について線

形化可能である

$$\epsilon(t) \approx -\frac{t}{\tau_Q} \quad (3.5.4)$$

と仮定される。ここで、 $\tau_Q = |\dot{\epsilon}(0)|^{-1}$ はクエンチ時間、 $1/\tau_Q$ はクエンチレートを表す。系が時間 $t=0$ で $\epsilon > 0$ から $\epsilon < 0$ に臨界点を越えると仮定している。 $\epsilon(t)$ を式 (3.5.3) に代入して t について解くと、「Freeze time」 t^* が

$$t^* \sim \tau_Q^{\frac{\nu z}{1+\nu z}} \quad (3.5.5)$$

としてスケーリングすることが分かる。この時刻における ϵ は、

$$\epsilon^* = \epsilon(t^*) \sim -\left(\frac{1}{\tau_Q}\right)^{\frac{1}{1+\nu z}} \quad (3.5.6)$$

としてスケーリングする。パラメータ ϵ^* は、図 3.2 に示すように、frozen 領域の左右の境界を定義する。frozen 領域で一定のままである相関長 ξ^* は、

$$\xi^* \sim |\epsilon^*|^{-\nu} \sim \tau_Q^{\frac{\nu}{1+\nu z}} \quad (3.5.7)$$

としてスケーリングする。トポロジカル欠陥密度 N_v のスケーリング則は、次元解析から

$$N_v \sim \tau_Q^{-(D-d)\frac{\nu}{1+\nu z}} \quad (3.5.8)$$

と予想される。ここで、 D は空間次元、 d はトポロジカル欠陥の次元を表す。有限温度では、KZM の古典的なバージョンは、式 (3.5.7) と (3.5.8) で同じ結果になる。ただし、トポロジカル欠陥は、量子 KZM のように量子揺らぎ [54] ではなく熱揺らぎによって生成される。式 (3.5.7) および (3.5.8) に見られるスケーリング則は、クエンチレート $1/\tau_Q$ が増加する（つまり、より速いクエンチの場合）と、欠陥サイズ ξ^* が縮小し、欠陥密度 N_v が増加することを予測する。 ξ^* の減少は、frozen 領域の境界を設定するパラメータ ϵ^* （式 (3.5.6)）を分析することで理解できる。速いクエンチとは、広い frozen 領域を持つことを意味するため、系は相関がまだ構築されていない、（遅いクエンチと比べて）臨界点から遠く離れた場所で Freeze する。

KZM は古典的な相転移については実験においても成功を得ているが、一方、量子相転移での KZM の実験研究は乏しいのが現状である。様々な量子系でのトポロジカル欠陥密度のスケーリング則を検証するには、実験が必要である。近年、Spin-1 BEC における強磁性ドメインの形成は、量子クエンチに起因するという証拠が示された [55]。また、1D,2D,3DBH モデルにおける MI 相から SF 相への動的相転移における KZM 検証実験がなされた [86]。このように近年、量子 KZM を検証するような理論・実験研究が活発に行われている。

3.6 Kibble-Zurek 機構の実証実験

非平衡相転移の研究は幅広く行われており、初期宇宙の構造の形成 [48] や断熱量子コンピューティングの実用性 [56] など多様なトピックに触れている。いわゆる KZM は古典的な相転移を介したクエンチの普遍的な特徴 [48,50]、主にトポロジカル欠陥形成の速度を理解するために用いられる。ここでの「クエンチ」とは、古典的には熱力学的パラメータを、量子的にはハミルトニアンパラメータを急速に変化させて、系を相転移の臨界点を横断させ、一

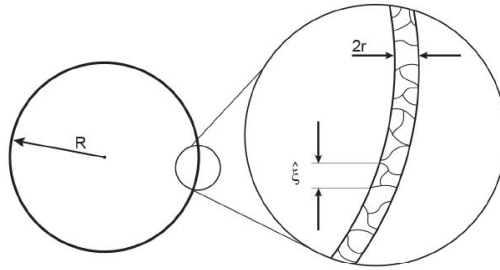


図 3.3: KZM を観測するために Zurek によって提案された実験系 [50] は図のように狭い環状内の液体ヘリウム-4 での超流動転移を元としている [53]。高速クエンチの後、それぞれ独立した位相ドメインが形成されると予想され、相関長 ξ によって典型的な大きさを持つ。[50] より引用。



図 3.4: 高速な温度急冷後、ネマチック液晶に形成されたランダム欠陥。[62] より引用。

定時間非平衡状態へと移すことである。KZM は、時間依存 Ginzburg-Landau モデルの数値シミュレーション [57–61] や液晶 [62]、超流動 ^3He [63, 64]、超伝導体 [65, 66]、および BEC 転移を行った希薄原子ガス [67, 68] のような幅広い凝縮系での実験によって古典的相転移の研究は成功を収めている。近年、KZM は量子相転移に拡張された [69–75]。古典的な場合とは対照的に、量子相転移 [35] ではゼロ温度での量子力学的発展を伴い、ハミルトニアンのパラメータを変化させることで臨界点を越え、クエンチが行われる。ここでは、KZM での実験について紹介する。

Zurek は、Kibble の宇宙における欠陥生成に関する理論を凝縮系へ拡張して実証実験を提案した [50]。特に Zurek は液体ヘリウム-4 の系を考慮した。ここで、通常相から超流動相への相転移は、図 3.3 にあるような環状内に圧力クエンチをすることによって駆動される。このような系では、超流動波動関数はオーダーパラメータとして用いることができる。クエンチが十分速い場合、超流動体内に独立した位相ドメインが形成されることがある。トポロジカル欠陥 (vortex) は、位相ドメインの境界に形成されると予想される。Zurek のアイデアは、KZ 理論の予想を実証するような多くの実験研究に影響を与えた。

KZM を観測する実験で最初に試みられたものの一つに、ネマチック液晶がある。ランダムな回位の形成は、液晶の急速な温度クエンチの後観測された。これは、軸周りの棒状分子の回転から生じ、図 3.4 のように直接見える線形欠陥である [62]。しかしながら、この実験で考慮されている相転移は一次であるため、KZ 理論の適用条件は完全には満たしていない。ヘリウム-4 の超流動転移を利用する Zurek のアイデアは、Hendry らによる実験で実装された [76]。しかし、急速な膨張後の vortex の観測が KZM 予想との一致の可能性を示唆したとしても、結果は、残留流れ乱流の存在、つまり他の種類のメカニズムを介して欠陥の形成を

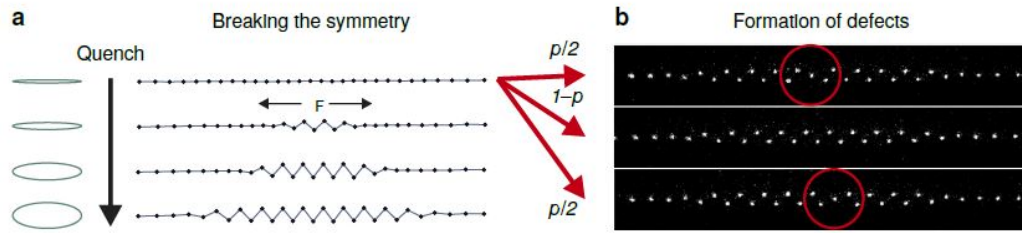


図 3.5: トラップポテンシャルの変形によるクーロン結晶のクエンチ手順の図。これによりジグザグ相の欠陥形成につながる。[83] より引用。

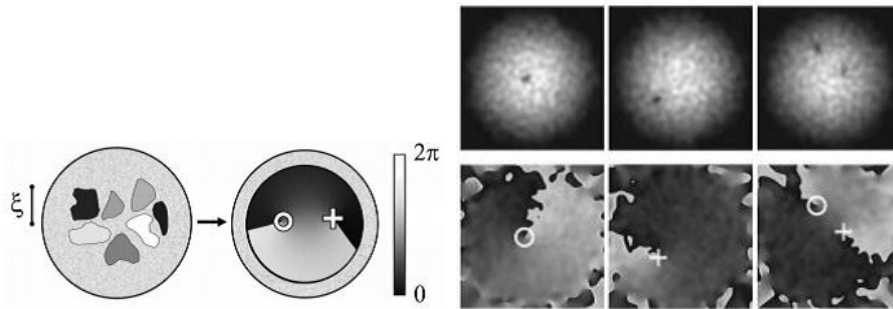


図 3.6: BEC 転移を横切る高速な温度冷却後に自発的に生成されるボソン気体中の vortex の観測 [67]。(左図) 異なる位相ドメインが合体するときの vortex ペアの形成図。(右図) 左・中央: 1つの vortex と右: 2つの vortex を含む BEC の画像。[67] より引用。

引き起こした可能性があるとして決定的ではないと見なされた。実験デザインを改善した後の実験では、このような欠陥を再現することができず、最初の観測は実際にはもっともらしい違う結果という考えを裏付けていた。vortex が存在しないのは、寿命が短いためであり、欠陥が崩壊し、系から急速に消失して観測することができないためであると考えられる。

その後、KZM の予想のいくつかは、非線形光学系 [77]、薄膜超伝導体 [78,79]、環状ジョセフソン接合 [80,81]、強磁性 spinor BEC [55]、Mott 絶縁体 [82,86] など、多くの異なる系で観察された。これらの研究は、速いクエンチで 2 次相転移を横切るような系におけるランダム欠陥形成のメカニズムの普遍性を裏付けているようである。

KZM を介して形成された欠陥の観測は、Pyka ら [83] と Ulm ら [84] によるイオン鎖で作られたクーロン結晶でも報告された。これらの人工システムは、トラップ周波数の変動によって駆動される、線形イオン鎖とジグザグ相間の 2 次構造相転移を示す。図 3.5 のようにジグザグ鎖の不規則性が直接観測されるのは、この相転移を高速クエンチで横切ることによる。クエンチ速度を適切に制御することで、欠陥数のスケールリングを明確に測定することが可能となった。これらの実験で考えられる欠点の一つは、クーロン結晶は通常、限られた数のイオンで構成され、無視できない有限サイズ効果があることである。

ボース・アインシュタイン凝縮した希薄原子ガスは、KZM をテストするための理想的な候補としてすでに考えられていた [85]。シンプルな系であり、温度やサンプルサイズなどの実験パラメータをクリーンな環境で細かく制御できる。BEC は、様々な異なる実験条件と形状で作成でき、吸収イメージングなどのいくつかの手法を使用して、その特性を直接観測することができる。この様な背景から、KZM を介した量子渦の生成は、BEC 転移の臨界点を横切るような温度クエンチ（蒸発冷却を用いた）の後に、パンケーキ型凝縮体中で Weiler ら [67] によって観測された。図 3.6 から分かるように、ランダムに形成された欠陥は、弾道膨張後

の BEC 密度分布で直接見ることが可能となった。しかし、その実験では、欠陥数のスケージングの測定は不可能であった。なぜなら、実験上の制限により、蒸発速度はわずかしか(少ないパターンしか)考慮されていなかったからである。

近年、ナトリウムのたばこ型 BEC で KZM を介して自然発生する欠陥を観測し、極低温ガスで初めて、クエンチ時間による欠陥数のべき乗測スケージングが測定された [68]。

第4章 2次量子相転移での クエンチダイナミクス

この章では、光学格子上的の粒子の振る舞いを表す Bose-Hubbard(BH) モデルにおける動的量子相転移を時間依存 Gutzwiller(t-GW) 法を用いて調べていく。ここでは、最近接相互作用の無い粒子を用いた場合を考える。ハミルトニアンのパラメータを時間の関数とし、Mott 絶縁体 (MI) 相と超流動 (SF) 相間の 2 次相転移をクエンチした時の系の振る舞いについて観察する。まず、Braun らの実験 [86] のセットアップを再現し、時間依存シュレディンガー方程式を解き、数値計算の結果と [86] の実験結果が良い一致を見せることを示す。しかしながら、それらの結果は Kibble-Zurek 機構 (KZM) で予想される結果とは合わないことが分かった。我々は数値計算による研究から、そのズレの原因を突き止めた。そして、我々は適切な KZ プロトコルを考慮し、SF オーダーパラメータだけでなく、相関長や vortex 密度のスケーリング則を計算していく。ここで我々は、いわゆる”Freeze time” \hat{t} を越えて、SF オーダーパラメータが振動を始める別の重要な時刻 t_{eq} の存在を示した。クエンチ時間 τ_Q における相関長や vortex 密度のスケーリング則の計算から、粗粒化過程の物理的描像を得た。最後に、クエンチ後の系の発展について調べた。上記の結果を考慮し、BH モデルのグローバルなダイナミクス描像に対する知見を与えていく。図 4.1 に、この章で議論・解明するキーワードを図示した。

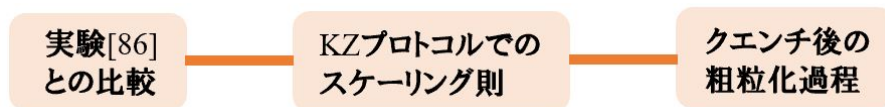


図 4.1: 第4章で議論・解明するキーワード群。

4.1 モデルと数値計算手法

最近接相互作用の無い BH モデルのハミルトニアンは、

$$H_{BH} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + H.c.) + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \mu \sum_i n_i \quad (4.1.1)$$

で記述される。ここで、 $\langle i, j \rangle$ は最近接するサイトを示し、 $a_i^\dagger(a_i)$ はサイト i でのボース粒子の生成 (消滅) 演算子であり、 $n_i = a_i^\dagger a_i$ はサイト i での粒子数である。 J はホッピング振幅、 U はオンサイト斥力相互作用、 μ は化学ポテンシャルを表す。 J と U の大小関係で 2 つの相が出現する。 $J \gg U$ の場合、SF 相となり、 $J \ll U$ の場合、MI 相となる。図 4.2 に 2 次元系の Static Gutzwiller(GW) 法 [87, 88] (2.4.1 節) で得られる相図を示す。

$\langle n \rangle = 1$ での臨界点は $(J/U)_c = 0.043$ である。ここで時間依存パラメータは、実験において操作可能なパラメータ ($J = J(t), U = U(t)$) [2] を用いて、動的量子相転移を起こす。

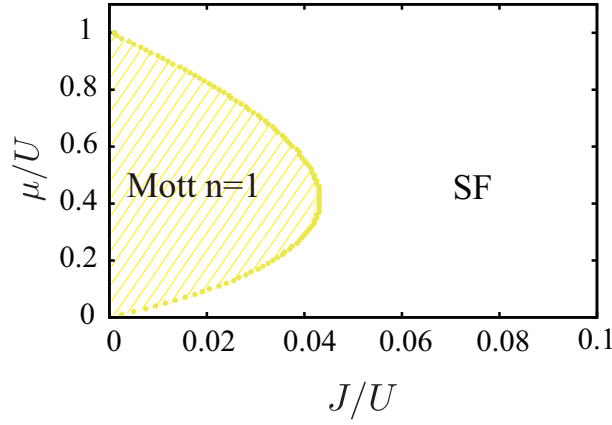


図 4.2: Static GW 法を用いて得られた MI 相-SF 相の相図。横軸がホッピングパラメータ J で、縦軸が化学ポテンシャル μ となっており、それぞれオンサイトエネルギー U をエネルギー単位としている。黄色い領域が平均粒子数 1 の MI 相、それ以外の領域が SF 相を表している。

ここでは、KZM のプロトコルを次のように設定する。エネルギーの単位として U の値を $U = 1$ に固定する。つまり、ここではホッピング振幅 $J(t)$ のみが時間依存する場合を考える。また、時間 t は \hbar/U を単位として測定する。ホッピング振幅 $J(t)$ と臨界点 J_c の関係を

$$\frac{J(t) - J_c}{J_c} \equiv \epsilon(t) = \frac{t}{\tau_Q} \quad (4.1.2)$$

と定義する。ここで、 J_c は U の値を固定した時の臨界値であることに注意する。 τ_Q は実験で調整可能なクエンチ時間であり、相転移にかかる時間と考える。

$J(t)$ を持つハミルトニアン $H_{BH}(t)$ を用いて、 $t = t_i (< 0)$ から $t = t_f (> 0)$ 間の時間依存シュレディンガー方程式を解いていく。系はそれぞれ、 $t = t_i$ では MI 相領域であり、 $t = t_f$ では SF 相領域である。ここで、ホッピング振幅 $J(t)$ は時間とともに線形変化するとし、臨界点 J_c を通過する時刻を $t = 0$ と考えている。しかし、緩和時間 t_r の急激な増加、つまり系が外部摂動に対し基底状態へ安定するまでの時間が非常に長くなると、系は $J(t)$ の変化に追従できなくなり、 $t = -\hat{t}$ で断熱変化が終わってしまう。緩和時間 t_r は、 $t_r = \epsilon(t)^{-z\nu} \equiv \left| \frac{J(t) - J_c}{J_c} \right|^{-z\nu} = \left| \frac{t}{\tau_Q} \right|^{-z\nu}$ として与えられ、条件 $t_r = \hat{t}$ は $\hat{t} = (\tau_Q)^{z\nu/(1+z\nu)}$ で与えられる。ここで、 ν, z は相関長臨界指数と動的臨界指数である。緩和時間は臨界点を越えた後徐々に減少して、系は「Adiabatic(断熱)領域」に再び入る。 $-\hat{t}$ から \hat{t} 間の領域は frozen 領域と呼ばれる (図 3.2)。

KZM では $t = \hat{t}$ において、相関長 $\xi(t)$ と vortex 密度 $N_v(t)$ のスケーリング則を以下のように予想する。

$$\begin{aligned} \xi(\hat{t}) &\propto \tau_Q^{\frac{\nu}{1+z\nu}} \\ N_v(\hat{t}) &\propto \tau_Q^{-2\frac{\nu}{1+z\nu}} \end{aligned} \quad (4.1.3)$$

KZM でのスケーリング則を調べるために、t-GW 法 [41, 87–92] (2.4.2 節) を用いる。この手法では、2 次元やそれ以上の高次元における実時間ダイナミクスを調べることが出来る。時間発展の間、粒子数保存は微小な時間間隔 dt [$\mathcal{O}(dt) \lesssim 10^{-4}$] を用いることで満足される。孤立系と同様に、t-GW 法ではパラメータ変化がない時間発展中は全エネルギーが保存される。

t-GW 法では、BHM のハミルトニアン (式 (4.1.1)) はオーダーパラメータの期待値 $\Psi_i = \langle a_i \rangle$

を導入することでシングルサイトハミルトニアン H_i に変形することができる。

$$H_{GW} = \sum_i H_i \quad (4.1.4)$$

$$H_i = -J \sum_{j \in iNN} (a_i^\dagger \Psi_j + H.c.) + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \mu \sum_i n_i$$

ここで、 iNN はサイト i の最近接サイトを表す。GW 波動関数は、

$$|\Phi_{GW}\rangle = \prod_i^{N_s} \left(\sum_{n=0}^{n_c} f_n^i(t) |n\rangle_i \right) \quad (4.1.5)$$

$$\hat{n}_i |n\rangle_i = n |n\rangle_i$$

N_s は全サイト数、 n_c は各サイトの最大粒子占有数を表す。今回単一 filling $\langle n_i \rangle = 1$ 、 $n_c = 6$ と考慮する。SF オーダーパラメータは $f_n^i(t)$ を用いて、

$$\Psi_i = \langle a_i \rangle = \sum_{n=0}^{n_c} \sqrt{n} f_{n-1}^{i*} f_n^i \quad (4.1.6)$$

で表現され、 $f_n^i(t)$ はシュレディンガー方程式

$$i\hbar \partial_t |\Phi_{GW}\rangle = H_{GW}(t) |\Phi_{GW}\rangle \quad (4.1.7)$$

を解くことによって決定される。初期状態は MI 相に対応している。ここで初期状態の MI 相は、オーダーパラメータが厳密に $\Psi_i = 0$ ではない。なぜなら、厳密にゼロとすると t-GW 法では系の時間発展が初期状態のまま固まり変化しないことが知られている [73]。なので、MI 相の初期状態は、 $\{f_n^i(t_i)\}$ の相対位相を完全にランダムにし、 $\{\langle n_i(t_i) \rangle\}$ に局所微小揺らぎを与えている。これは t-GW 法において量子揺らぎを表している。式 (4.1.7) の $H_{GW}(t)$ は $J \rightarrow J(t)$ として時間発展する。時間発展は 4 次のルンゲ-クッタ法 [93] を用いている。以下の節では、観測量として 10 個の初期状態の平均値を用いている。

4.2 実験プロトコルにおけるシミュレーション

近年、極低温原子系の量子ダイナミクスの実験が活発に行われている。その中でも、Braun らの実験では 1、2、3 次元系 BH モデルにおける相関長 $\xi \propto \tau_Q^b$ の指数 b を測定した [86]。以下で彼らの実験プロトコルを説明する。系の初期状態は MI 相領域であり $(U/J)_i$ とする。その後、 (U/J) は徐々に減少して臨界点 $(U/J)_c$ を越えてさらに減少し SF 相領域である $(U/J)_f$ まで到達する。彼らはクエンチ時間を $\tau_Q = t_f - t_i$ と定義しており、 $t_i(t_f)$ はクエンチの開始時刻（終了時刻）である。この実験では、

$$\frac{(U/J)_i}{(U/J)_f} \approx 35 \quad (4.2.1)$$

と設定している。図 4.3 にプロトコルを図示する。

我々は SF オーダーパラメータや相関長 ξ 、vortex 密度 N_v などの物理量を測定する。相関

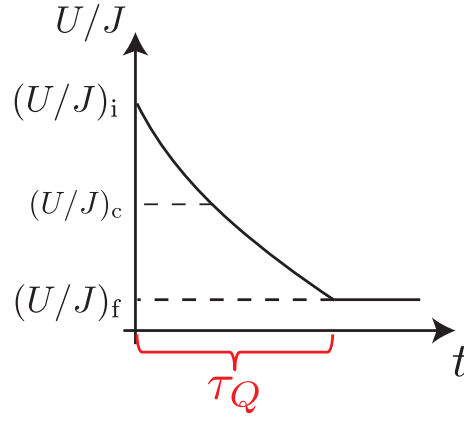


図 4.3: 実験 [86] におけるプロトコル。横軸は時間 t を表し、縦軸は制御パラメータ U/J を表している。初期状態に MI 相を用意し、 U/J を変化させることで動的相転移を起こし、SF 相へとクエンチする。プロトコルは、近似的に線形クエンチであり、 $(U/J)_i$ から $(U/J)_f$ までの時間をクエンチ時間 τ_Q と定義している。

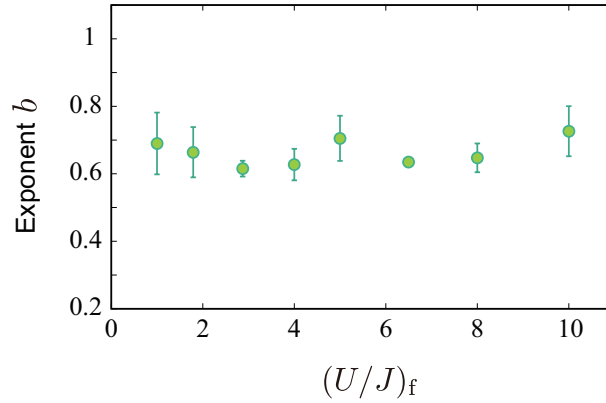


図 4.4: 実験 [86] と同様のプロトコルで行った相関長の指数 b の数値計算結果。横軸は (U/J) の最終値 $(U/J)_f$ を表し、縦軸は得られた指数 b を表す。10 個のサンプルの平均を求め、エラーバーを示している。この結果は、実験 [86] の結果とは良い一致を見せているが、KZ スケーリング仮説の予想 ($b = 0.402$) とは異なる結果となっている。

長 ξ と vortex 密度 N_v は、

$$\begin{aligned} \langle \Psi_i^* \Psi_j \rangle &\propto \exp(-|i - j|/\xi), \\ N_v &= \sum_i |\Omega_i|, \\ \Omega_i &= \frac{1}{4} [\sin(\theta_{i+\hat{x}} - \theta_i) + \sin(\theta_{i+\hat{x}+\hat{y}} - \theta_{i+\hat{x}}) \\ &\quad - \sin(\theta_{i+\hat{x}+\hat{y}} - \theta_{i+\hat{y}}) - \sin(\theta_{i+\hat{y}} - \theta_i)], \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

ここで θ_i は Ψ_i の位相、 $\hat{x}(\hat{y})$ は $x(y)$ 方向の単位ベクトルを表す。[86] での実験プロトコルを用いて、様々な $(U/J)_f$ での相関長を計算し、得られた指数 b を図 4.4 に図示した。

MI 相では、各サイトの粒子数揺らぎは非常に小さく、 $f_n^i(t_i)$ の相対的な位相揺らぎは大きい。図 4.4 では、指数 b は $(U/J)_f$ の値に依らずほぼ一定の値 ($b \simeq 0.6 - 0.7$) に収まっている。この結果は、2次元系での実験 [86] の観測値と良い一致を見せている。しかし、実験の測定値は、 $(U/J)_f = 2.0 - 3.0$ で b の値がわずかに増加している。[86] では、測定結果を KZ ス

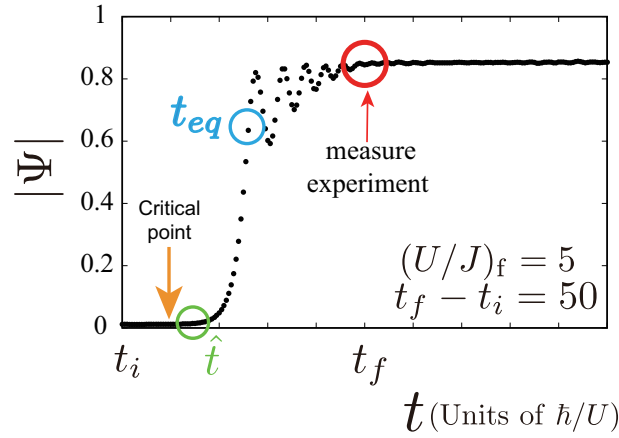


図 4.5: 実験 [86] のプロトコルにおけるオーダーパラメータ振幅 $|\Psi|$ の時間発展。横軸は時間 $t(\hbar/U$ を単位としている)、縦軸はオーダーパラメータの振幅 $|\Psi|$ 。 $(U/J)_f = 5$ 、 $\tau_Q = 50$ の結果を図示している。図には、 \hat{t} 、 t_{eq} 、 実験 [86] での測定点を表す。

ケーリング則の値 ($b = \nu/(1 + z\nu)$) と比較を行っている。3次元 XY モデルは指数 $\nu = 0.672$ と $z = 1$ [94] を持っており、この値を代入すると KZ スケーリング則は $b = 0.402$ となる。この値 ($b = 0.402$) は明らかに我々の数値計算結果 ($b \simeq 0.6 - 0.7$) や実験で得られた値とは異なる。この事実から、先行研究 [86] では、2次元 BH モデルにおける動的量子相転移に KZ スケーリング則を適用することはできないと結論付けている。我々はこの結論に至る前に、上記のシミュレーションのプロトコルを慎重に調べて、この結果のズレの原因を探ることにする。そこで我々は時間の関数として、BEC の平均振幅

$$|\Psi| = \frac{1}{N_s} \sum_i |\Psi_i| \quad (4.2.3)$$

を計算した。この結果を図 4.5 に図示した。

$|\Psi|$ は sudden クエンチで [92] において観測された様な興味深い振る舞いを示した。臨界点を越えた直後、 $|\Psi|$ は非常に微小な値となっている。 \hat{t} を越えた後、 $|\Psi|$ は急激に増加し、その後振動を始める。後に見られるが、これは $|\Psi|$ の典型的な振る舞いである。我々は時刻 \hat{t} を先行研究 [95] から、

$$|\Psi(\hat{t})| = 2|\Psi|_{\text{critical point}} = 2|\Psi(t=0)| \quad (4.2.4)$$

と定義した。

図 4.5 では、KZM で予想される \hat{t} と実験 [86] で相関長を観測した時刻を示している。KZM は \hat{t} において適用されるべきであり、一方実験 [86] での観測点は \hat{t} ではなく振動領域にある。これこそが上記でのズレの原因であると考えられる。また、クエンチによって系の動的振る舞いを特徴付けるような時間領域が少なくとも 2 つ存在することも分かる。実際、図 4.5 での $|\Psi|$ において、BEC の成長が緩やかになる重要な時刻が存在する。我々はこの時刻を t_{eq} と呼ぶ。この t_{eq} 以降に $|\Psi|$ が振動を始めて、その後重要な粗粒化（位相が揃う）過程が起こることが予想される。次の節では、より適切な KZ プロトコルを用いたシミュレーションを行う。

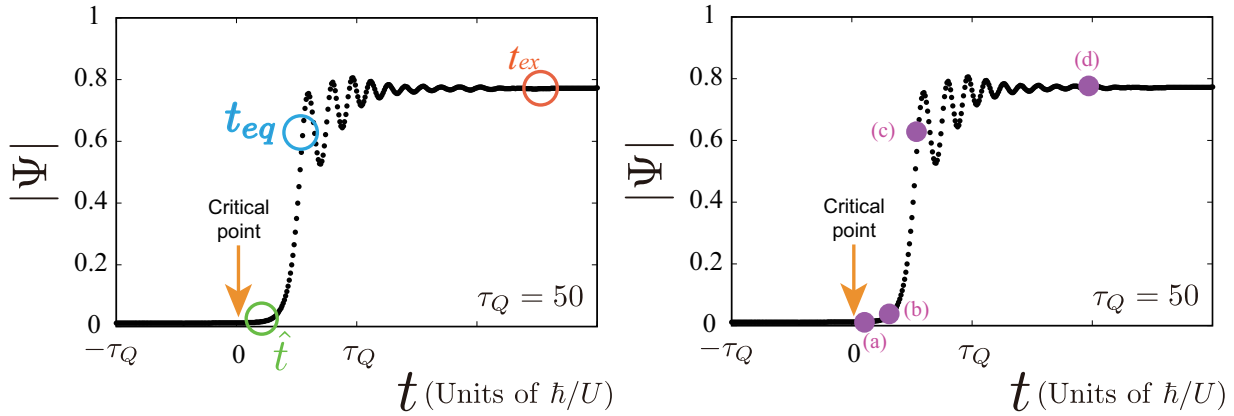


図 4.6: (左図) $\tau_Q = 50$ の時の KZ プロトコルによるオーダーパラメータ振幅 $|\Psi|$ の時間発展。横軸は時刻 t 、縦軸はオーダーパラメータ振幅 $|\Psi|$ 。この図から、 $\hat{t} \approx 14$ 、 $t_{eq} \approx 27$ と分かる。(右図) (a)-(d) は、物理量を測定する時刻 (測定点) を表している。

4.3 Kibble-Zurek プロトコルにおけるシミュレーション

前節で、我々の数値計算結果および [86] の実験結果が KZ スケーリング則とズレた原因の可能性を指摘した。この節では、KZ プロトコルにおける 2次元 BH モデルのダイナミクスを数値的に調べ、KZ スケーリング則が成り立つかどうかを調べる。

初期時刻を $t_i = -\tau_Q$ とすると、式 (4.1.2) から $J(t_i) = 0$ となり、系は深い MI 相となる。一方、クエンチの終時刻は $t_f = \tau_Q$ つまり $J(t_f) = 2J_c$ (深い SF 相) となる。我々の数値シミュレーションでは系のサイズは 100×100 である。

計算したオーダーパラメータ振幅 $|\Psi|$ を図 4.6 左に図示した。この図は図 4.5 とよく似た振る舞いを示している。そして、ある代表的な時刻を図 4.6 右 ((a)-(d)) のように決め、物理量を測定する。図 4.6 右で決めた時刻における局所振幅 $|\Psi_i|$ のスナップショットを図 4.7 に図示した。

図 4.6 から、 $t_{eq}/\hat{t} \approx 2$ であることが分かるが、これはつまり、 \hat{t} から t_{eq} 間が非常に短いことを表す。しかし、オーダーパラメータ振幅の変化は $|\Psi(t_{eq})|/|\Psi(\hat{t})| \approx 30$ であり、急激に増加していることが分かる。スナップショットを見ると $t = 30$ で明確なドメイン構造が形成され、ドメインのサイズは時間と共に大きくなる。一方で、振動領域の後、 $t = 100$ で $|\Psi_i|$ の一様状態を形成する。

図 4.8 に示した Ψ_i の位相を見ると非常に興味深い様子が見られる。臨界点を越えた後 ($t = 5$)、小さなドメインが形成されている様子が見られる。その後、 $t = 15 - 100$ においてドメインの大きさは徐々に大きくなっていき、 $t = 30$ において BEC の局所振幅 $|\Psi_i|$ と位相には明らかな相関関係が見られる。局所振幅と位相の間に相関があることを他の $t (< 100)$ についても検証を行った。振幅 $|\Psi|$ が $t = 100$ で振動領域に到達した後、 Ψ_i の位相におけるドメイン構造がまだ存在している。ここでは、オーダーパラメータは振動しているが、相関長は徐々に大きくなっている。

我々はさらに、図 4.9 に vortex 分布と vortex の個数を図示した。 $t = 15$ において、臨界点を通過した瞬間から vortex の急激な減少が起きていることが分かる。

上記の計算から、 \hat{t} と t_{eq} 間で BEC の位相の発展は滑らかに変化すると予想されるが、BEC の振幅 $|\Psi|$ は急激に増加することが予想される。事実、この予想は \hat{t} や t_{eq} での相関長と vortex 密度の計算によって確認される。つまり、相関長の変化 $\xi(t_{eq})/\xi(\hat{t}) \approx 2$ や vortex の変化

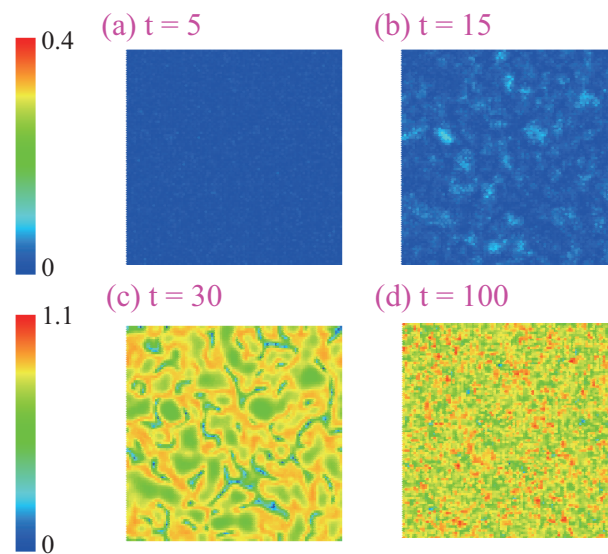


図 4.7: 図 4.6 右の測定点 (a)-(d) における、オーダーパラメータの局所振幅 $|\Psi_i|$ (SF 局所オーダー) のスナップショット。SF 局所オーダーは時間とともに大きくなる様子がはっきりと見られる。(c) $t = 30$ でドメインが見られ、(d) $t = 100$ ではドメインが消え、一様になっている。

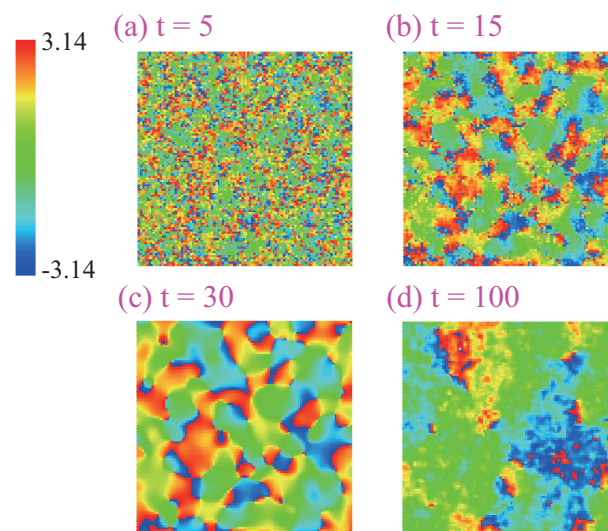


図 4.8: 図 4.6 右の測定点 (a)-(d) における、 Ψ_i の位相のスナップショット。時間とともに位相ドメインの成長が見られ、振動領域の終わりではドメインが非常に大きくなっている。

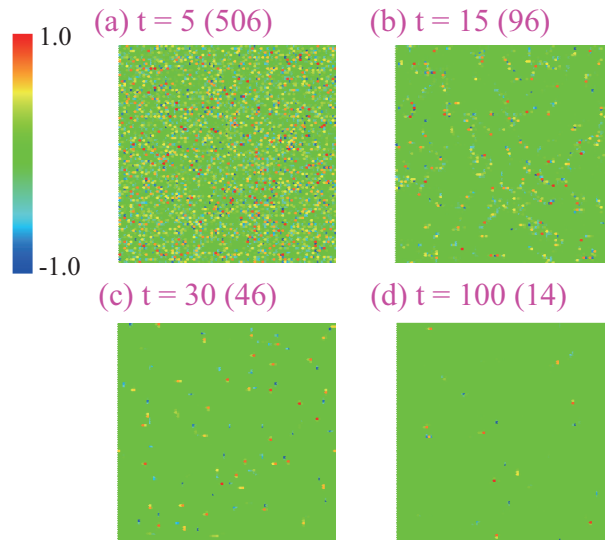


図 4.9: 図 4.6 右の測定点 (a)-(d) における、vortex Ω_i のスナップショット。括弧の中の数字は、vortex と anti-vortex の合計数 (N_v) を表している。 \hat{t} を超えた後、急激に vortex 個数が減少している。

$N_v(t_{eq})/N_v(\hat{t}) \approx 0.3$ とオーダーパラメータ振幅の変化 $|\Psi(t_{eq})|/|\Psi(\hat{t})| \approx 30$ を比較することで確認できる。この観測結果は、BH モデルにおける SF 形成過程のダイナミクスと粗粒化過程を理解するための重要なポイントの一つであると考えられる。ここで注意しなければならないのは、系の発展は \hat{t} から t_{eq} まで、そして振動領域においても非断熱的な非平衡現象であるという点である。

ここで我々は、KZ スケーリング則が \hat{t} だけでなく t_{eq} まで成り立つと予想した。KZ スケーリング則が成り立つかについて調べるために、様々な τ_Q ($20 \leq \tau_Q \leq 400$) において $t = \hat{t}$ と $t = t_{eq}$ での相関長 $\xi \propto \tau_Q^b$ の指数 b と vortex 密度 $N_v \propto \tau_Q^{-d}$ の指数 d を計算する。もし b や d が $t = \hat{t}$ と $t = t_{eq}$ で近い値を持っていたら、 \hat{t} から t_{eq} 間の BEC の滑らかな変化の描像をさらに支持することになる。つまり、 \hat{t} と t_{eq} で同じスケーリング則に従うことを意味する。我々の結果を図 4.10、4.11 に図示した。図 4.10、4.11 の結果から、相関長 ξ と vortex 密度 N_v の

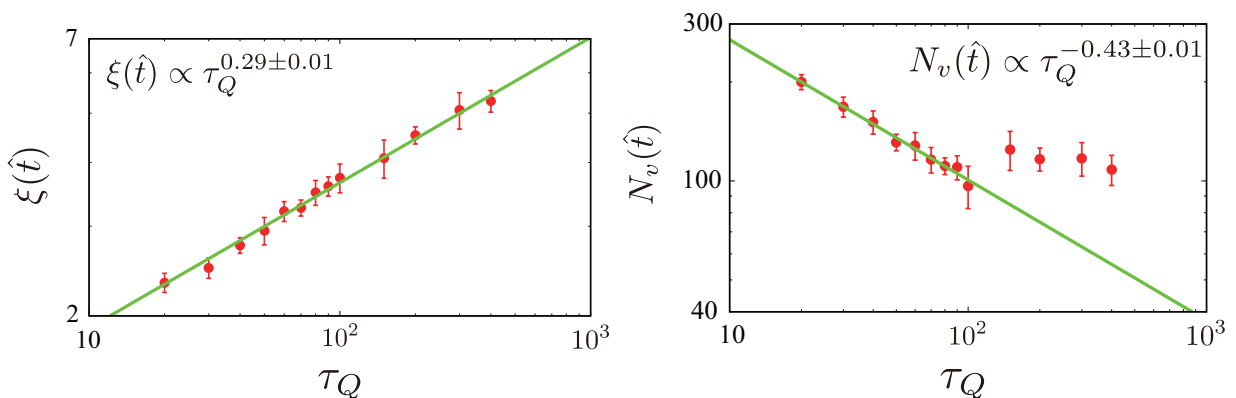


図 4.10: $t = \hat{t}$ における相関長スケーリングの指数 b と vortex 密度スケーリングの指数 d の結果。横軸はクエンチ時間 τ_Q 、縦軸はそれぞれ $t = \hat{t}$ における相関長 $\xi(\hat{t})$ 、vortex 密度 $N_v(\hat{t})$ を表す。相関長 $\xi(\hat{t})$ は $\tau_Q = 20 - 400$ においてきれいなスケーリングを示している。vortex 密度 $N_v(\hat{t})$ は $\tau_Q > 100$ の領域でスケーリングに合わなくなっている。この振る舞いについては、本文内で議論している。

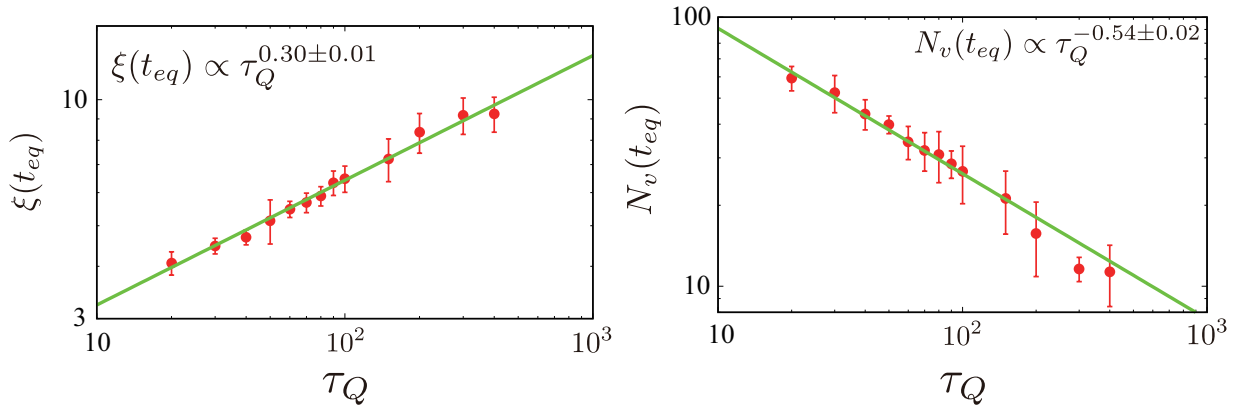


図 4.11: $t = t_{eq}$ における相関長スケーリングの指数 b と vortex 密度スケーリングの指数 d の結果。横軸はクエンチ時間 τ_Q 、縦軸はそれぞれ $t = t_{eq}$ における相関長 $\xi(t_{eq})$ 、vortex 密度 $N_v(t_{eq})$ を表す。相関長 $\xi(t_{eq})$ と vortex 密度 $N_v(t_{eq})$ の両方とも $\tau_Q = 20 - 400$ でスケーリングに従うことが分かる。 $\tau_Q \leq 100$ において、指数 b と d は $t = \hat{t}$ での結果と近い値となっている。

両方がスケーリング則を示しており、 $t = \hat{t}$ や $t = t_{eq}$ での指数はお互い近い値を取っていることが分かる。図 4.10 での $\tau_Q > 100$ において、vortex 密度 $N_v(\hat{t})$ は異常な振る舞いが見られるが、他の物理量は $\tau_Q = 400$ までスケーリング則を満たしている。系のサイズを 64×64 にして $N_v(\hat{t})$ を計算したことで、この $N_v(\hat{t})$ での異常な振る舞いは有限サイズ効果ではないことを確認した。この結果を理解するために、様々な τ_Q における $J(\hat{t})$ の値を表 4.1 にまとめた。表 4.1 から、 τ_Q が大きくなるにつれて、 $J(\hat{t})$ は臨界点に近づいていく。臨界点を過ぎた直後には、多数の vortex が存在し、その結果、適切なスケーリング則が成り立たなくなると考えられる。

図 4.10、4.11 から、指数 b と d は $b \approx 0.3$ と $d \approx 0.45 - 0.55$ と推定することが出来る。この値は、3次元 XY モデルで得られる指数 ($b = 0.402, d = 0.804$) もしくは平均場で得られる指数 ($b = 0.25, d = 0.5$) とは一致しないことに注意しなければならず、これらの間の値を取っている。t-GW 法によって得られた BH モデルの臨界指数は、単純な平均場理論のものとは異なる可能性が示唆されている。この問題は現在未解決な問題であり、future work である。 $\tau_Q \leq 100$ での $t = \hat{t}$ と $t = t_{eq}$ における状態の類似性を示すために、様々な τ_Q における $t = \hat{t}$ と $t = t_{eq}$ のスケーリング則を調べる。この結果を図 4.12 に図示した。

この結果から明らかのように、 $t = \hat{t}$ と $t = t_{eq}$ は非常に近い指数を取っている。つまり、 $\hat{t}(\tau_Q) \propto t_{eq}(\tau_Q)$ として表せる。スケーリング則は $\tau_Q = 400$ まで成り立っており興味深い結果である。この $\tau_Q = 400$ は現在の数値計算において十分に大きな値である。

上記の議論から結論付けられることとして、 $t = \hat{t}$ から $t = t_{eq}$ までオーダーパラメータ振幅は急激に増加するが、BEC の位相自由度とトポロジカル欠陥、つまり vortex は滑らかな変

表 4.1: 様々なクエンチ時間 τ_Q における $J(\hat{t})$ の値。MI 相-SF 相転移の臨界点は $J_c/U = 0.043$ である。

τ_Q	20	40	60	80	100	200	400
$J(\hat{t})$	0.065	0.057	0.054	0.052	0.051	0.048	0.046

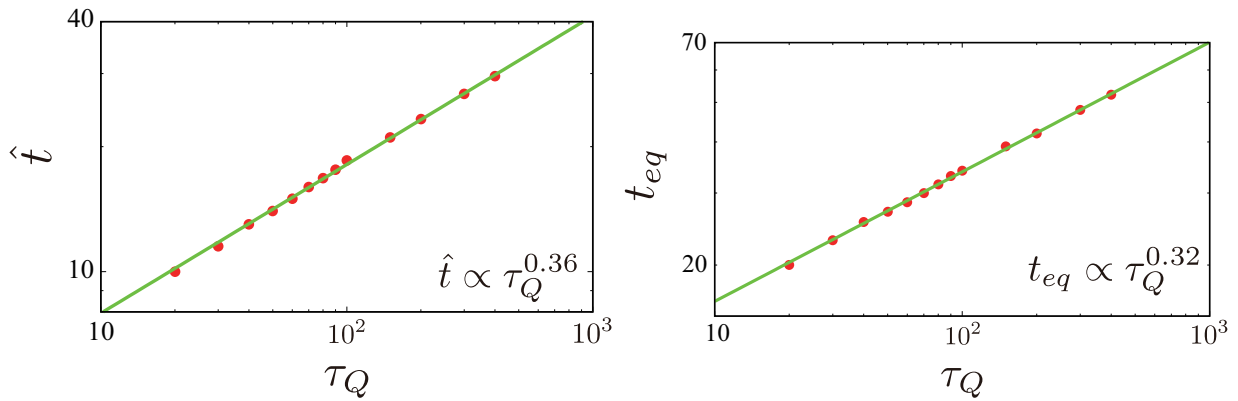


図 4.12: τ_Q に対する \hat{t} と t_{eq} のスケールング則。横軸はクエンチ時間 τ_Q 、縦軸はそれぞれ \hat{t} 、 t_{eq} の値を表す。これらの結果から $\hat{t}(\tau_Q) \propto t_{eq}(\tau_Q)$ となっていることが分かる。

化が起こっている。つまり、 $t = \hat{t}$ から $t = t_{eq}$ まで、クエンチされた系は滑らかな粗粒化（位相が揃う）過程を起こす。我々の結果から、このスケールング仮説は \hat{t} から t_{eq} までの時間領域で成り立つことが予想される。

一方、図 4.8(位相のスナップショットの図) に示されている通り、 $t > t_{eq}$ 後の振動の落ち着く t_{ex} までオーダーパラメータ振動領域で粗粒化過程が生じている。我々は平均運動エネルギーとオンサイト相互作用エネルギーの時間発展を別々に測定し、それらが BEC の挙動と同期していることを見出した。BEC の振幅が大きい（山）時、運動（オンサイト相互作用）エネルギーは小さい（大きい）が、BEC の振幅が小さい（谷）時、運動（オンサイト相互作用）エネルギーは大きい（小さい）ことを確認した。これらの観測結果から、BEC の振幅の山は非均一な粒子分布から来ており、振幅の谷は系を一様にしようとする SF の流れを伴う粗粒化過程という物理的描像を得た。結果として、振動領域ではドメインが徐々に大きくなっていく。このイメージを図 4.13 に図示した。

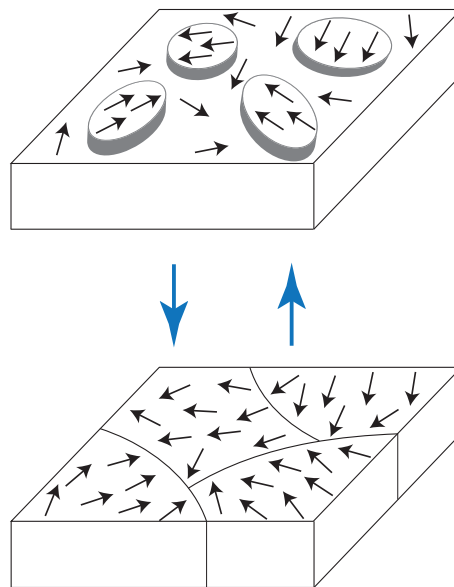


図 4.13: t_{eq} から t_{ex} における粗粒化過程の物理的描像。非一様な密度領域は強固な BEC を持つ一方、phase-ordering 過程によって大きくそれぞれ一様な位相領域が形成される。

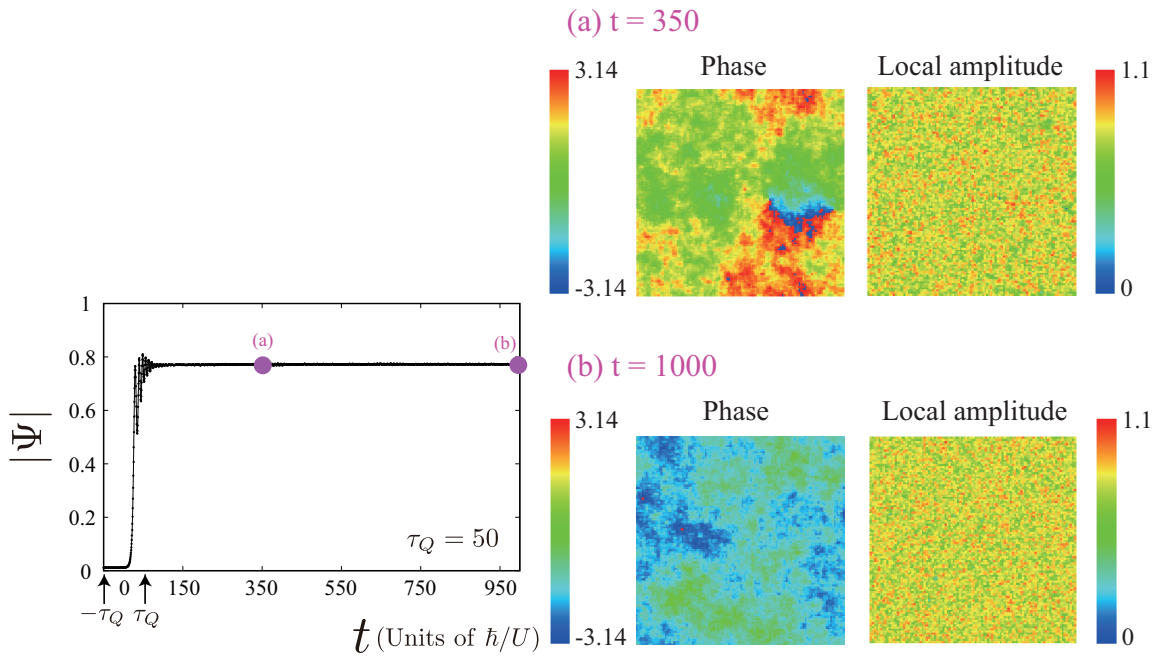


図 4.14: クエンチ後の長時間発展を示している。(左図) $\tau_Q = 50$ における長時間のオーダーパラメータの振幅 $|\Psi|$ の時間発展を表し、物理量の測定点 (a),(b) を示している。(右図) (a) $t = 350$ と (b) $t = 1000$ におけるオーダーパラメータ Ψ_i の位相スナップショットと局所 SF 振幅 $|\Psi_i|$ を図示している。

4.4 クエンチ後の振る舞い

前節で、我々は臨界点を通過した後の BEC のダイナミクスを観察し、時間発展における物理的描像を得た。BEC の振動過程は徐々に弱くなり、最終的には一定の値に落ち着く。その時の時刻を t_{ex} とする (図 4.6 左)。しかしながら、 $t = t_{ex}$ においても BEC オーダーパラメータの位相はまだ非一様であり、トポロジカル欠陥 (vortex) が存在している。それゆえ、BEC がクエンチ後にどの状態に近づくのか疑問に感じられる。これは、平衡状態が形成されるか、不均一な非晶質の様な状態が持続するかの観点から重要な問題である [96]。クエンチ後の系は孤立系なので、全エネルギーは保存される。そして、上記の 2 つのシナリオの両方が可能である。

上記の問題を調べるために、クエンチ後の系の長期挙動を観測し、長時間の局所振幅 $|\Psi_i|$ とオーダーパラメータの位相を計算し、スナップショットを図 4.14 に図示した。

前節で見たように、局所振幅 $|\Psi_i|$ は中間領域においてかなり均一になっている。一方、BEC の位相は非常に長時間ドメイン構造を持っているが、系は最終的に一様状態へと向かう。事実、図 4.14 での $t = 1000$ における状態はトポロジカル欠陥を有していない (SF 状態であっても、BEC の位相の微小揺らぎは残る)。このような粗粒化過程は 1990 年代に研究された phase-ordering [97] によって理解される可能性がある。均一な BEC は、非晶質の様な状態よりも低いエネルギーを有すると予想されるので、エネルギーのいくらかは BEC に関与していない粒子に伝達した可能性が考えられる。これらの問題は現在詳細は不明であり、今後の解明に期待する。

4.5 まとめ

この章では、t-GW法を用いてMI相からSF相への動的量子相転移の物理的描像を得た。我々は、時間依存密度行列繰り込み群(t-DMRG)やtime-evolving-block decimation(TEBD)のような数値シミュレーションを適用することが困難である2次元系における動的量子相転移に焦点を当てた。

最初に先行研究[86]の実験で調べられている相関長の指数と我々の数値シミュレーションで得られた指数の値が良い一致を見せることを示した。そして、我々の数値シミュレーション結果と[86]の実験結果がKZスケール則とズレた原因も指摘した。

次に、t-GW法を用いて時間依存シュレディンガー方程式を解くことで、クエンチされた2次元BHモデルの動的振る舞いを調べた。BECの振幅が興味深い振る舞いをすることを示し、 \hat{t} を超えた後にも重要な時間スケール t_{eq}, t_{ex} の存在も調べた。時間スケール t_{eq} の存在は先行研究[95]で議論されており、 \hat{t} から t_{eq} 間でBECの振幅が急激に増加する。一方、 t_{eq} から t_{ex} 間でBEC振幅は強く振動する。これらの振る舞いを理解するために、BECオーダーパラメータの局所振幅、局所位相、そしてvortex密度を計算した。 \hat{t} から t_{eq} の間、BEC振幅が急激に増加するにもかかわらず、滑らかな粗粒化過程が起こることが明らかとなった。また、この期間とは対照的に、 t_{eq} から t_{ex} に至るまで強い粗粒化過程が起こっていることも判明した。さらに、クエンチダイナミクスがKZMのようなスケール則を満たすかどうかを研究するために、クエンチ時間 τ_Q の関数として相関長とvortex密度を計算した。その結果、我々は \hat{t} と t_{eq} における相関長の指数(b)とvortex密度の指数(d)をそれぞれ得て、それらが近い値を取ることが明らかになった。この結果は、 \hat{t} から t_{eq} 間のBECの時間発展はphase-ordering過程の観点から非常に滑らかであるという物理的描像を支持する結果である。我々が得た他の重要な観測結果として、クエンチ時間が非常にゆっくりになると($\tau_Q \rightarrow \infty$)、 $t = \hat{t}$ においてvortex密度は単純なスケール則には従わなくなることが分かった。これは、 \hat{t} が大きくなるにつれて、 $J(\hat{t}) \rightarrow J_c$ となることが原因と考えられる。この観測結果は実際に実験を行うときに役に立つ情報であると思われる。

最後に、クエンチ後の状態がドメイン構造を有しているので、 t_{ex} 後にどのように系が時間発展するかを観察した。その結果、このドメイン構造は長時間残っているが、最終的には系は一様状態に落ち着いたことが分かり、この状態が平衡状態であると考えられる。

本研究の新しい発見を観測するための実験の設定について述べていく。特に、極低温源ガスの実験では、オンサイト相互作用エネルギー U の調整条件を示すことは有用である。実験の設定では、典型的な保持時間の上限は100ms[98]である。オンサイト相互作用エネルギー U は、フェッシュバツハ共鳴技術によって変化させることができる。例として、表4.5に U の調整条件を示した。ここでは、近年の実験で用いられている、 ^{39}K や ^{87}Rb 冷却原子を想定している。

表 4.2: 実験系における様々な原子でのオンサイト相互作用エネルギー U の値。時間スケールは $t = 1 \rightarrow 0.1\text{ms}$ 。 λ は光学格子の波長。 E_R はrecoilエネルギー $E_R = \hbar^2/(2m\lambda^2)$ (m は原子質量)。

	λ [nm]	E_R/\hbar [kHz]	$U [E_R]$
Ref. [86] ^{39}K	736	9.4	0.17
Ref. [98] ^{87}Rb	738	4.2	0.38
Ref. [82] ^{87}Rb	812	3.5	0.45

第5章 1次量子相転移での クエンチダイナミクス

この章では、前章とは異なり最近接 (NN) 斥力相互作用が存在する Bose-Hubbard (BH) モデルの非平衡ダイナミクスについて調べる。特に、系の状態が Density-wave (DW) 相と超流動 (SF) 相間を変化する動的量子相転移に着目する。このモデルでの注目点として、DW 相と SF 相間の相転移は 1 次相転移であるということである。一般的に、1 次相転移の動的相転移ではスケールリング則は成立しないと広く信じられている。しかし、DW 相から SF 相への動的量子相転移では、2 次相転移で見られるような Kibble-Zurek 機構 (KZM) におけるスケールリング則に類似するスケールリング則が確認できた。この可能性について議論を行う。一方、SF 相から DW 相への動的量子相転移では、系の時間発展は SF 相での初期状態に依存する。Gutzwiller (GW) 法を用いて得られた初期状態を使用して時間発展を調べると、臨界点を超えた後に SF と DW ドメインが混ざった状態が出現する。SF オーダーパラメータのコヒーレンスは時間発展と共に失われる。これは、古典系におけるガラス転移と似た現象と考えられる。また、微小な局所位相揺らぎをもつ SF 状態で時間発展させたとき、系は大きな DW ドメインを形成することが明らかになった。次の節以降では、これらについて詳しく調べる。図 5.1 に、この章で議論・解明するキーワードを図示した。

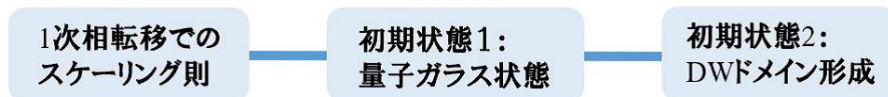


図 5.1: 第5章で議論・解明するキーワード群。

5.1 モデルと相図

BH モデルに NN 斥力相互作用を考慮した拡張 BH (EBH) モデルのハミルトニアンは、

$$H_{EBH} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + H.c.) + \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) + V \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j - \mu \sum_i n_i \quad (5.1.1)$$

ここで、 $\langle i, j \rangle$ は正方格子におけるサイト i の最近接サイト j を表し、 $a_i^\dagger (a_i)$ はサイト i でのボソンの生成 (消滅) 演算子であり、 $n_i = a_i^\dagger a_i$ である。 J はホッピング振幅、 U はオンサイト相互作用エネルギー、 μ は化学ポテンシャル、 V は NN 斥力相互作用であり、本章では V の存在が非常に重要となる。

また、DW 相を考慮するため half filling に近い状況、つまり系の平均密度 ρ を

$$\rho \equiv \frac{1}{N_s} \sum_i^{N_s} \langle n_i \rangle \approx \frac{1}{2} \quad (5.1.2)$$

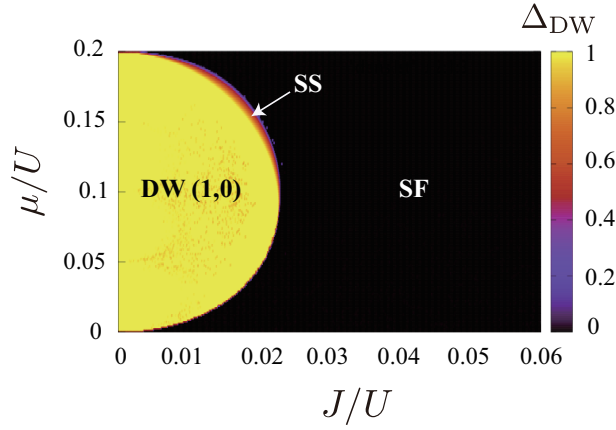


図 5.2: Static GW 法によって得られた $V = 0.05$ における EBH モデルの基底状態相図。横軸は J/U 、縦軸は μ/U であり、 Δ_{DW} をプロットしている。状態相としては、DW 相、SF 相、supersolid(SS) 相が存在する。DW 相は $(1,0,1,0,1,\dots)$ 状態であり、SS 相は DW 相と SF 相の境界に薄く存在している。

とする。ここで、 N_s は系の全格子数であり、我々は $N_s = 64 \times 64$ や $N_s = 100 \times 100$ を用いる。完全な half filling ではなく、half filling に近い状況にする理由は、前章でも触れていたように、完全な half filling では数値計算において時間発展しなくなるためである。

エネルギー単位として $U = 1$ とし、時間 t は \hbar/U を単位として測定する。

Static GW 法を用いて式 (5.1.1) で表される系について調べる。まず、 $V/U = 0.05$ における基底状態相図を計算し、その結果を図 5.2 に図示した。

$V/U = 0.05$ の場合、相図には DW 相、SF 相、SuperSolid(SS) 相の 3 相が見られるが、SS 相は非常に薄い領域となっている。今回我々は、DW 相の tip ($(J/U)_c \simeq 0.022$) を通過し SF 相に入る相境界に興味がある為、SS 相は通らず影響は無いと考える。DW 相の tip を含む $(\mu/U)_c = 0.1$ 上における系のエネルギー、粒子密度、SF オーダーパラメータの大きさ

$$|\Psi| \equiv \frac{1}{N_s} \sum_i |\Psi_i|, \quad \Psi_i \equiv \langle a_i \rangle \quad (5.1.3)$$

を図 5.3 に図示した。図 5.3 の結果から、系が half filling $\rho \simeq 1/2$ にあることが確認でき、 $|\Psi|$ が $J_c/U \simeq 0.022$ において有限の飛びがある事から DW 相と SF 相間は 1 次相転移であることが確認できる。1 次相転移の存在は、DW 相と SF 相がそれぞれ別々の長距離秩序を有するので妥当な結果である (DW 相は密度、SF 相は位相の長距離秩序を有する)。

slow quench 下における系のダイナミクスを調べるために、前章と同様に t-GW 法を用いる。式 (5.1.1) の EBH モデルのハミルトニアンをシングルサイトハミルトニアン H_i に近似する。期待値 $\Psi_i = \langle a_i \rangle$ を導入して、

$$\begin{aligned} H_{\text{GW}} &= \sum_i H_i \\ H_i &= -J \sum_{j \in i\text{NN}} (a_i^\dagger \Psi_j + H.c.) + \frac{U}{2} n_i (n_i - 1) \\ &\quad + V \sum_{j \in i\text{NN}} n_i \langle n_j \rangle - \mu n_i \end{aligned} \quad (5.1.4)$$

ここで、 $i\text{NN}$ はサイト i の最近接サイトを表し、ホッピングと NN 斥力相互作用においてハートリーフォック型の近似を用いている。式 (5.1.4) での量子系 H_{GW} を解くために、前章同様

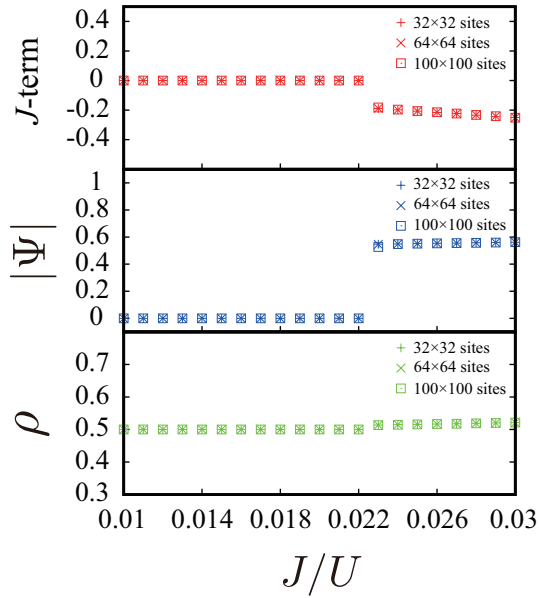


図 5.3: いくつかの系のサイズによる DW 相-SF 相の臨界点近傍での物理量の振る舞い。横軸は J/U を表し、縦軸は上から、ホッピング J 項のみのエネルギー、SF オーダーパラメータの振幅 $|\Psi|$ 、平均密度 ρ を表している。この結果から、臨界点 $J_c/U \simeq 0.022$ において有限の飛びがある事から DW 相と SF 相間は 1 次相転移であることが確認できた。

に GW 波動関数を導入する。

$$|\Phi_{GW}\rangle = \prod_i^{N_s} \left(\sum_{n=0}^{n_c} f_n^i(t) |n\rangle_i \right), \hat{n}_i |n\rangle_i = n |n\rangle_i \quad (5.1.5)$$

n_c は各サイトの最大粒子占有数であり、 $n_c = 6$ としている。いくつかの場合で $n_c = 10$ で計算を行い、 $n_c = 6$ で十分有効であることは確認している（図 5.4 右と図 5.7 右を見よ）。第 4 章と同様に、SF オーダーパラメータを

$$\Psi_i = \langle a_i \rangle = \sum_{n=1}^{n_c} \sqrt{n} f_{n-1}^{i*} f_n^i \quad (5.1.6)$$

で定義し、様々な初期状態を用いてシュレディンガー方程式

$$i\hbar \partial_t |\Phi_{GW}\rangle = H_{GW}(t) |\Phi_{GW}\rangle \quad (5.1.7)$$

を解くことで系の時間発展を追っていく。4 次のルンゲ・クッタ法で解き、 U と V を固定しつつ $J \rightarrow J(t)$ としてクエンチを行う。次節から詳細を見ていく。

5.2 DW 相から SF 相へのクエンチ

まず初めに DW 相から SF 相へのダイナミクスを見ていく。この節ではホッピング振幅 J をプロトコル

$$\frac{J(t) - J_c}{J_c} \equiv \epsilon(t) = \frac{t}{\tau_Q} \quad (5.2.1)$$

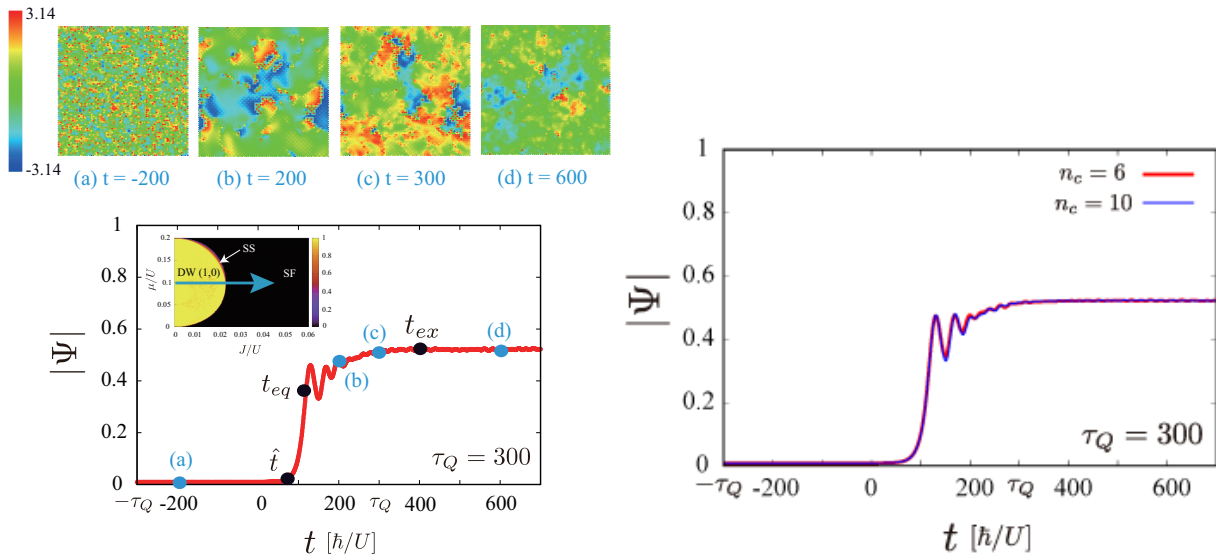


図 5.4: (左図) $\tau_Q = 300$ での SF オーダーパラメータの振幅 $|\Psi|$ の時間発展とそれぞれの時刻における SF オーダーパラメータ Ψ_i の位相スナップショット。 \hat{t} , t_{eq} はそれぞれ $\hat{t} \approx 70$, $t_{eq} \approx 120$ である。 $|\Psi|$ の振動が終わる時刻 t_{ex} は、 $t_{ex} \approx 400$ である。 t_{eq} から t_{ex} における Ψ_i の位相の粗粒化過程は大きなスケールで起こる [99]。(右図) $n_c = 10$ の場合における $|\Psi|$ の計算結果。 $n_c = 6$ の結果とほぼ一致することが確認できる。

でクエンチしていく。ここで、 τ_Q は実験で調整可能なクエンチ時間である。 $t = -\tau_Q$ において、DW オーダーを持つ初期状態 ($J(\tau_Q) = 0$) を 10 サンプル用意した。前節でも述べたように、完全な DW 状態ではなく微小な局所密度揺らぎを加えている。式 (5.1.7) を解き、 $|\Psi_{GW}\rangle$ を求める。スケーリングに用いる物理量は、サンプルの平均値を取るものとする。式 (5.2.1) における線形クエンチは、 $J(t_f) = 0.044 (> J_c)$ となる時刻 $t = t_f$ まで行う。系がどのように平衡状態に近づくかを見るために、その後の系の振る舞いも観察する。

まず、時刻 t の関数として $|\Psi|$ の典型的な振る舞い ($\tau_Q = 300$) について図 5.4 に示す。時刻 $t = 0$ において、系は臨界点 $J_c/U \approx 0.022$ を横切る。臨界点を横切った後、しばらく $|\Psi|$ が非常に小さい期間があり、その後急激に増加する様子が見られる。増加した後、 $|\Psi|$ は振動し、一定の値に落ち着く。この振る舞いは、前章での Mott 絶縁体 (MI) 相から SF 相へのクエンチ [99] の振る舞いと非常に似ていることが分かる。図 5.4 での \hat{t} は $|\Psi(\hat{t})| = 2|\Psi(0)|$ で定義されており、 t_{eq} は $|\Psi|$ の振動する直前の時刻となっている。 t_{ex} は振動が収まった時刻を表している。

MI 相から SF 相へのダイナミクスと比較すると、SF オーダーパラメータ $|\Psi|$ は $t > t_{eq}$ においてより小さくなっている。MI 相から SF 相では $|\Psi| \sim (0.8 - 0.9)$ であったのに対して、今回は $|\Psi| \sim 0.5$ となっている。この違いは単に平均粒子数の違いから来ている (MI-SF: $\rho \sim 1$, DW-SF: $\rho \sim 0.5$)。

また図 5.4 右には、 $n_c = 6$ と $n_c = 10$ の結果を図示しており、 $n_c = 6$ での有効性を示している。ここで、測定する物理量について定義していく。DW 相でのオーダーパラメータ Δ_{DW}

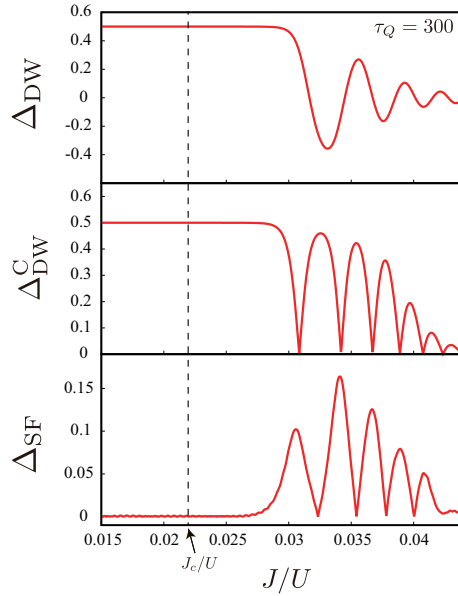


図 5.5: $\tau_Q = 300$ における時間の関数としての Δ_{DW} 、 Δ_{DW}^C 、 Δ_{SF} 横軸は J/U である。平衡臨界点 $J_c/U \simeq 0.022$ を超えた後、物理量は振動を始める。

と Δ_{DW}^C を、

$$\Delta_{DW} \equiv \frac{1}{N_s} \sum_i (-1)^i \langle n_i \rangle \quad (5.2.2)$$

$$\Delta_{DW}^C \equiv \frac{1}{2N_s} \sum_{\langle i,j \rangle} |\langle (n_i - n_j) \rangle| \quad (5.2.3)$$

SF オーダーパラメータの偶奇差 Δ_{SF} を、

$$\Delta_{SF} \equiv \frac{1}{2N_s} \sum_{\langle i,j \rangle} \left| |\Psi_i| - |\Psi_j| \right| \quad (5.2.4)$$

と定義し、それぞれの典型的な振る舞いについて図 5.5 に図示する。

これらの物理量は $J \approx 0.045$ まで時間の関数として図示されており、振動していることが分かる。振動は徐々に小さくなっており、系は一樣 SF 状態へと近づいている。 τ_Q がより小さくなる（クエンチが速くなる）と、系の反応は臨界点 J_c/U からより離れた J/U で始まるが、他の τ_Q の値でも同様な振る舞いを示す。

近年、2次量子相転移での KZ スケーリングの応用がいくつかの量子系において議論されている。一方、1次相転移では緩和時間が定義できないため、スケーリング則が成り立たないと広く信じられている。古典統計モデルでは1次相転移において別のタイプのスケーリング則 [100] が提案されている。近年、量子イジングリングの非平衡ダイナミクスが調べられ、1次相転移の有限サイズスケーリング則が提案されている [101]。

今回の1次相転移のモデルでスケーリング則が成り立つかどうかを調べるために、我々は $t = \hat{t}$ と $t = t_{eq}$ での相関長 ξ と vortex 密度 N_v （前章の式 (4.2.2) で定義）を測定する。2次相転移での KZ 仮説 [53] は、 \hat{t} は系が frozen 領域を終え平衡状態へ再び入る時刻を表している。一方、 t_{eq} は SF オーダーパラメータが粗粒化過程に移る時刻 [99] を表している。この結果を図 5.6 に図示した。この結果から $t = \hat{t}$ では ξ と N_v はスケーリング則の指数 $b = 0.25$ と $d = 0.26$ をそれぞれ得て、 $\hat{t} \propto \tau_Q^{0.45}$ となることが分かる。一方、 $t = t_{eq}$ ではそれぞれの τ_Q で揺らぎが存在するが、 $\tau_Q > 20$ の領域で ξ と N_v のスケーリング則が成り立っている

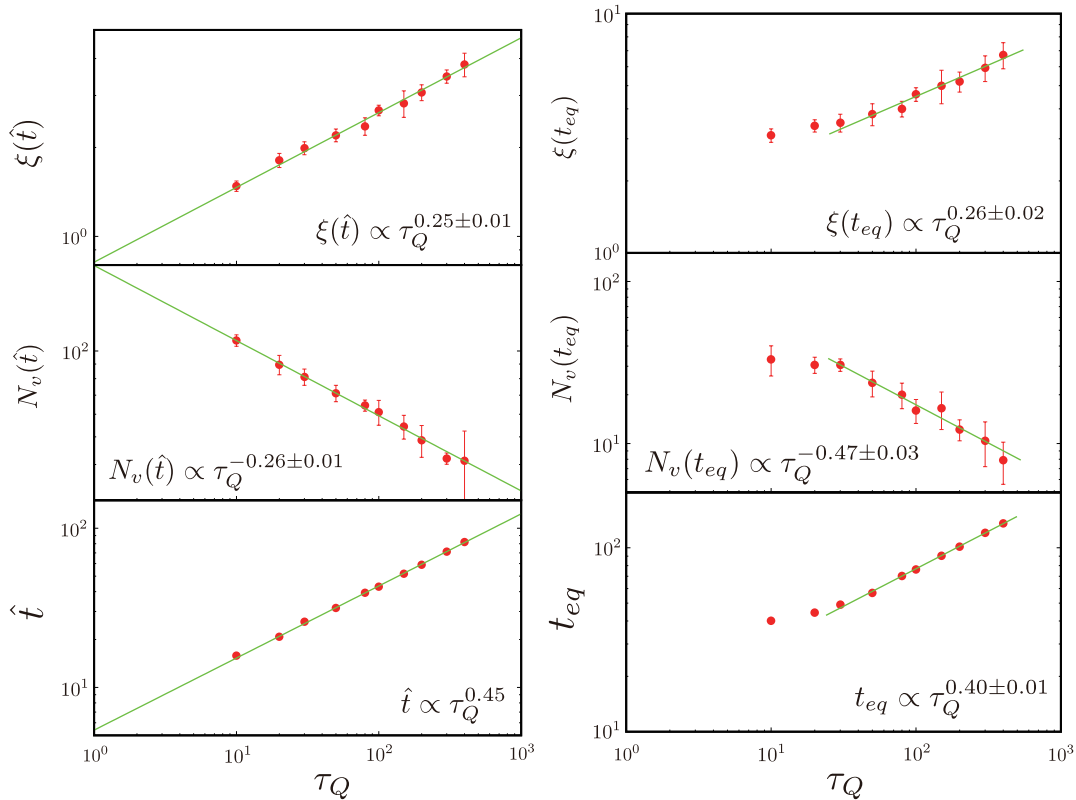


図 5.6: $t = \hat{t}$ (左図) と $t = t_{eq}$ (右図) における相関長 ξ と vortex 密度 N_v の τ_Q に対するスケーリング則の結果。それぞれある時間領域内でスケーリング則が成り立つことが分かる。

($b = 0.26$, $d = 0.47$, $t_{eq} \propto \tau_Q^{0.40}$)。上記の結果は、KZMに加えて、スケーリング則を生成する別のメカニズムが存在することを示唆している。臨界点を超えた後、 Δ_{DW} や Δ_{SF} は偶奇サイト揺らぎを持っており、系は非一様状態であることが分かっている (図 5.5)。非一様である理由は、 $t = \hat{t}$ で ξ と N_v の臨界指数が $b = d/2$ と予想される関係を満たさない為だと考えられる。一方、 $t = t_{eq}$ では系はほぼ一様となっている為 $b \sim d/2$ を満たしていることが分かる。

図 5.4 と図 5.5 において $t_f = \tau_Q = 300$ の線形クエンチの結果が図示されている。 t_f 経過後、系は平衡状態へ近づいている。そこで、SF の相関長がどのように発展していくかに興味がある。相関長の時間発展の結果を図 5.7 に示した。予想したように、臨界点を超えた後相関長が大きくなっていく様子が確認できる。また、図 5.7 に $n_c = 6$ と $n_c = 10$ の場合の相関長の時間発展を図示し、類似した振る舞いが見られることを確認した。しかし、相関長の増加は $t \sim t_{eq}$ から弱くなっており、 $t \sim 500$ で飽和し、一定の値となる。位相の結果を調べるために、 N_v を測定し、 $t > 500$ では vortex が存在しないことを確認した。系は有効温度 T_{eff} で十分大きな t において有限温度 SF 相に落ち着くと予想できる。2次元系での有限温度 SF は準長距離秩序を有しており、相関長は発散する (Kosterlitz-Thouless(KT) 相)。上の結果は、最終段階において KT 相とは別の状態が実現していることを示唆している。しかし、系の振る舞いは平均粒子密度 ρ に強く依存している可能性がある。この興味深い問題を明らかにする為には、さらなる研究が必要である。実際に我々は、次の章で平均粒子密度 $\rho \approx 1$ で $V/U = 0.375$ [102] においてこの問題を議論する。DW \rightarrow SS \rightarrow SF のクエンチ過程で、相関長は大きな t でも増加し続けることを明らかにした。この結果は、SF の KT 相 (準長距離秩序と相関長の発散) がそこで実現されている可能性を示唆している。

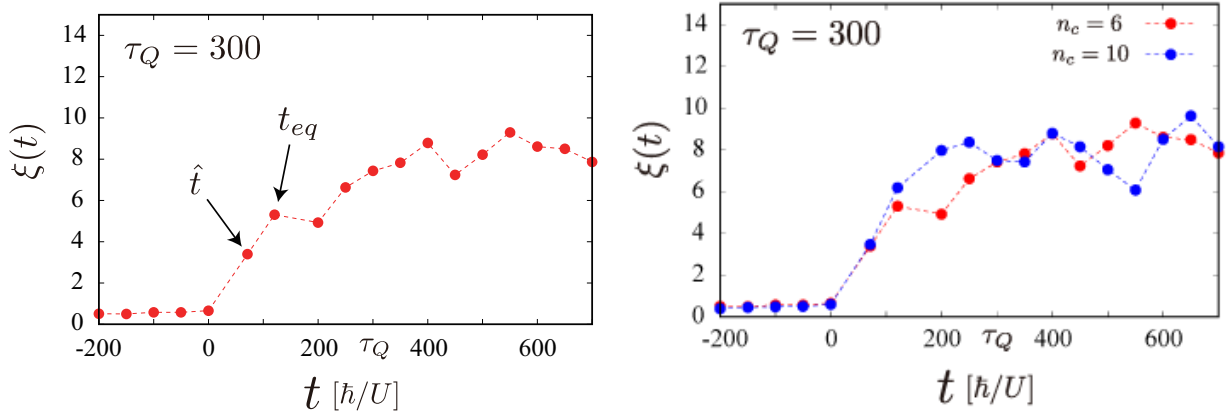


図 5.7: (左図) $\tau_Q = 300$ における相関長の時間発展結果。 t_{eq} を超えた後、相関長の増加は弱くなる。(右図) $n_c = 10$ の場合との比較。 $n_c = 10$ の場合も、 t_{eq} を超えた後、増加が弱まること分かる。

5.3 SF 相から DW 相へのクエンチ

この節では、SF 相から DW 相へのクエンチにおける系の時間発展を調べていく。その結果、系の振る舞いが初期状態に大きく依存することが分かった。以下の小節で詳しく見ていく。

5.3.1 Gutzwiller 法で得られた初期状態

SF 相から DW 相への動的量子相転移を調べていく。ホッピング振幅 $J(t)$ は以下の様なプロトコルで線形クエンチする。

$$\frac{J_c - J(t)}{J_c} \equiv -\epsilon(t) = \frac{t}{\tau_Q} \quad (5.3.1)$$

クエンチダイナミクスを明確に解明するために、この小節では 3 つのケースを検証する。最初のケースをケース A とし、ホッピング振幅の初期状態を $J(t = -\tau_Q) = 2J_c = 0.044$ に設定し、クエンチの終点を $J(t = \tau_Q) = 0$ とする (図 5.8 左)。これまで同様に t-GW 法を用いていく。

ケース A では、後で出てくるケース B、ケース C と同様に初期状態は Static GW 法で得られた最低エネルギー状態を用いている。 $\tau_Q = 300$ における $|\Psi|$ 、 Δ_{DW}^C 、 Δ_{SF} の結果を 5.8 右に図示した。 $|\Psi|$ は $t < 0$ において振動しているが、 $J < J_c (t > 0)$ の領域では安定状態へと移行している。この振る舞いは、SF オーダーパラメータ振幅と位相がお互い共役な量である為、 Ψ_i は SF 相において位相コヒーレンスを持ち、振幅の大きな揺らぎを持っていることに由来する。一方で、DW 相である $t > 0$ 領域では、位相コヒーレンスは失われ、SF 振幅は安定する。DW オーダーパラメータ Δ_{DW}^C は、 $t = 0$ の臨界点を過ぎた後でも有限値を持たない。これらの結果は、ある種のドメイン構造が形成されていることを示している。つまり、小さな DW ドメインが局所 SF 領域と共存している可能性がある。

$t = \tau_Q$ での Ψ_i の振幅と粒子密度、位相のスナップショットを図 5.9 に図示した。上記の結果から予想されることとして、DW ドメインと有限の SF 振幅を持つ領域は互いに重複することなく共存する。ケース A では、クエンチを $J(\tau_Q) = 0$ で止めるため、クエンチ後は粒子の

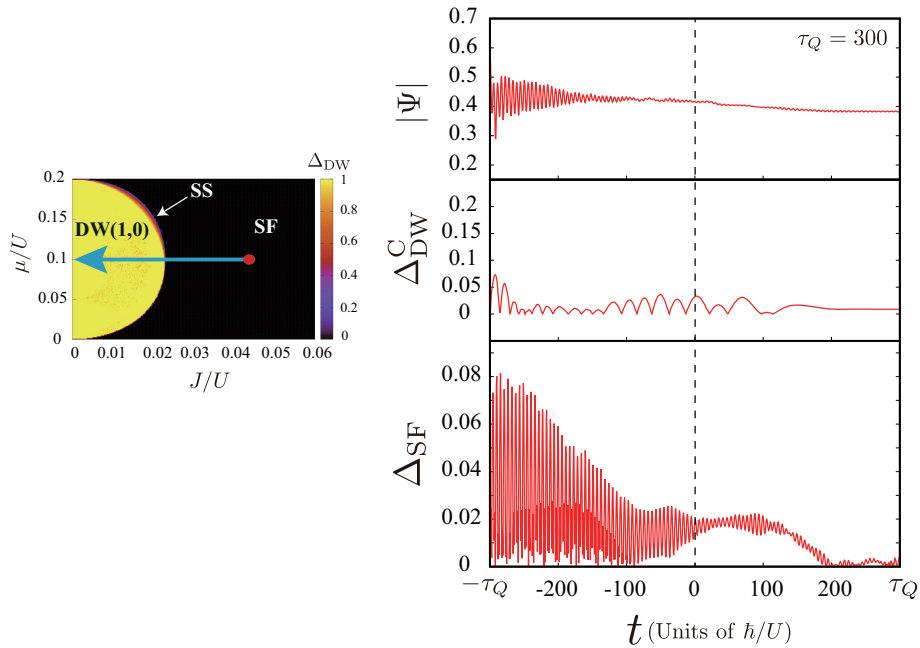


図 5.8: (左図) $J(t_f) = 0$ (ケース A) の SF 相から DW 相へのクエンチプロトコル。DW 相のチップ (J_c/U) を $t = 0$ に通るようにクエンチする。(右図) $|\Psi|$ 、 Δ_{DW}^C 、 Δ_{SF} の時間発展。 $t > 0$ において、SF 振幅と DW オーダーパラメータは、典型的な DW 相の振る舞いを見せない。

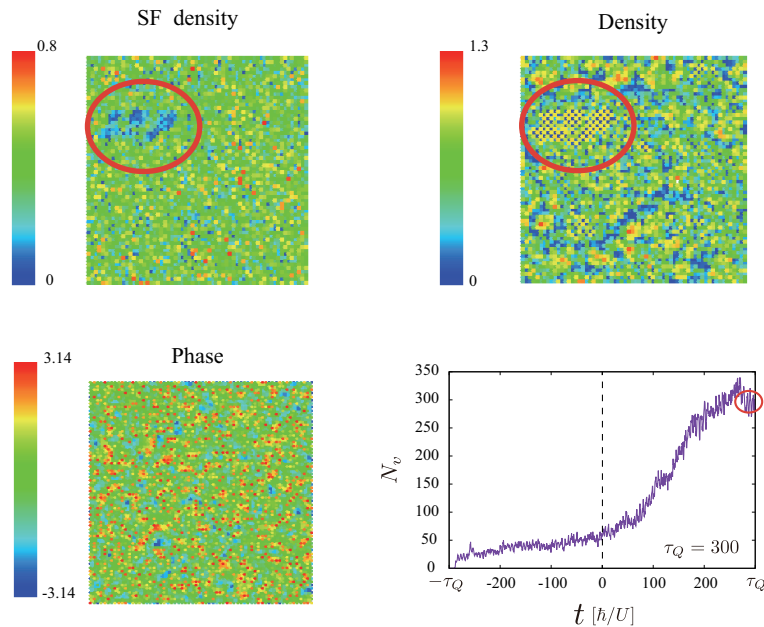


図 5.9: $t = \tau_Q = 300 (J/U = 0)$ における局所 SF オーダー、局所密度、SF オーダー位相のスナップショットと vortex 密度の時間変化を図示している。 Ψ_i のグローバルなコヒーレンスは存在しておらず、赤丸で示されている所に有限サイズ DW ドメインが一部形成されている。

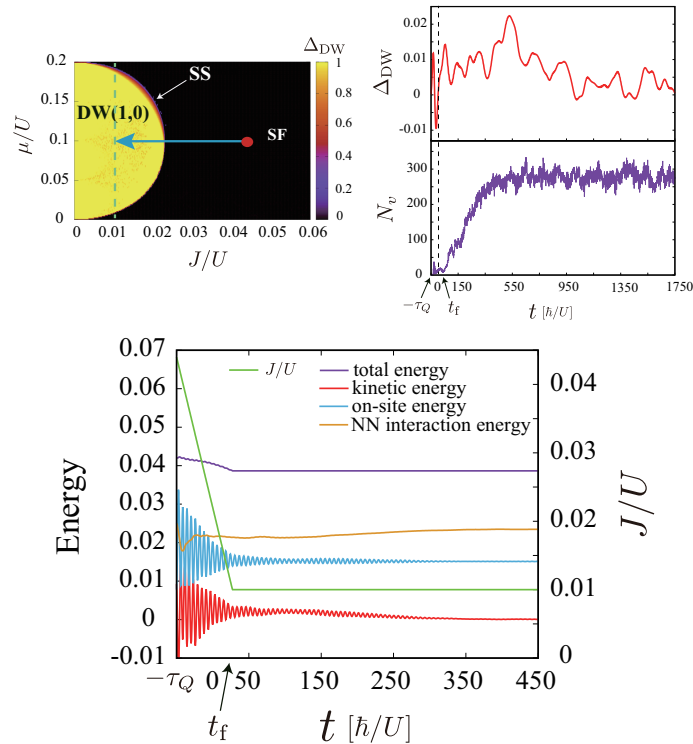


図 5.10: (左図) $J(t_f) = 0.01$ (ケース B) とした時の SF 相から DW 相へのクエンチプロトコル。(中央図) $\tau_Q = 50$ における Δ_{DW} 、 N_v の時間発展結果。真の DW オーダーは形成されていない。 $t = 0$ で臨界点 J_c/U を超え、 N_v はしばらく小さな値を取っており、この時 SF オーダーは生き残っている。その後、急激に増加し SF オーダーが壊される。(右図) J/U 、全エネルギー、ホッピングエネルギー、オンサイトエネルギー、NN 斥力相互作用エネルギーの時間変化。 $t_f = 0.55\tau_Q = 27.5$ を超えた後、系の全エネルギーは孤立系と同様に一定の値になる (全エネルギー保存)。

移動を起こさない。図 5.9 の粒子密度のスナップショットは $t > \tau_Q$ での状態を描写している。同様に図 5.9 を見ると、 $\tau_Q = 300$ はゆっくりなクエンチなので、 $t = \tau_Q$ において Ψ_i の位相コヒーレンスが壊されると予想される。 Ψ_i の予想された振る舞いを裏付けるために、時間の関数として vortex 密度の測定を行う。 $t = \tau_Q$ において、vortex 密度 N_v は $N_v \sim 300$ と十分に大きくなっている。まとめると、ケース A ($\tau_Q = 300$) では、クエンチ後に局所 DW 領域と SF 領域のドメインが共存する非一様状態を形成する。SF オーダーパラメータはゆっくりなクエンチのため位相コヒーレンスを徐々に失っていく。

一方、より小さい $\tau_Q = 50, 100$ の場合、SF オーダーパラメータ Ψ_i は $t = \tau_Q$ で有限の値を取る。 Ψ_i の位相は $t > \tau_Q$ で斥力相互作用の存在によって長距離コヒーレンスが徐々に失われる。

ケース B で、我々はクエンチプロトコルを次のようにする。まず、 $t = -\tau_Q$ において $J(-\tau_Q) = 0.044$ から始まり、臨界点 $t = 0$ において $J(0) = 0.022$ となり、最終到達点 $t = t_f$ において $J(t_f) = 0.01$ となるようにクエンチする。ここで、 $t_f = 0.55\tau_Q$ である。このプロトコルを図 5.10 左に図示した。我々は、 $t = t_f$ 以降に系がどのように発展するかについても調べた。図 5.10 中央には $\tau_Q = 50$ において観測した物理量が示されている。DW オーダーパラメータ Δ_{DW} は、 J_c を過ぎた後も長期間に渡って振動していることが分かる。図 5.10 右を

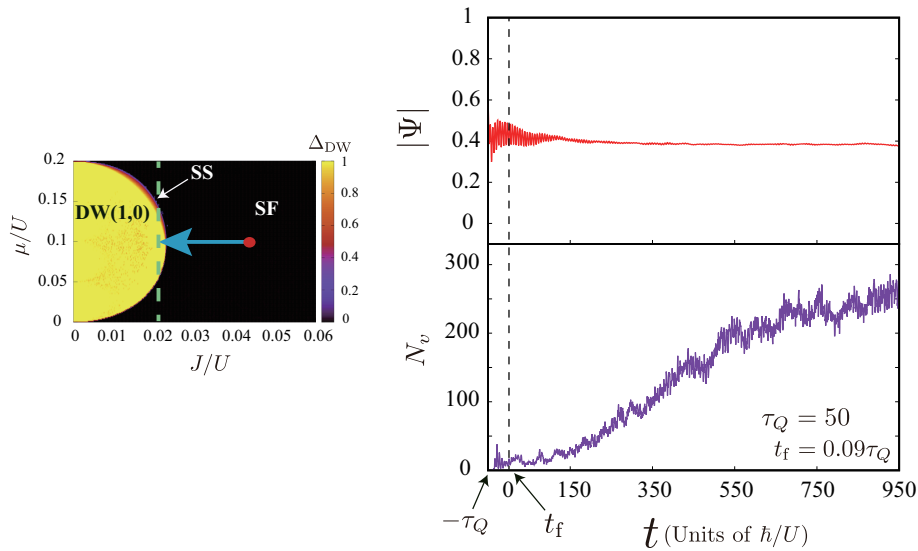


図 5.11: (左図) $J(t_f) = 0.02$ (ケース C) とした時の SF 相から DW 相へのクエンチプロトコル。(右図) $\tau_Q = 50$ における $|\Psi|$ と N_v の時間発展。 N_v の増加は、 $J(t_f) = 0$ や $J(t_f) = 0.01$ に比べてゆっくりになっている。SF オーダー振幅 $|\Psi|$ は、 t が大きくなると一定の有限値に収束する。しかし、 N_v は緩やかに増加を続けるため、クエンチで形成された supercooled 状態は準安定状態ではない。

見ると、全エネルギーは t_f まで緩やかに減少し、運動エネルギーやオンサイトエネルギーは $t < t_f$ において振動していることが分かる。それらに比べると、NN 斥力相互作用は安定している。この運動エネルギーとオンサイトエネルギーの振る舞いは、ほとんどが局所密度の揺らぎが原因である。また、NN 斥力相互作用の安定性は、NN サイト $j \in iNN$ 間に働く力により打ち消しあう機構が生じているためである。臨界点 $t = 0$ を通過した後、vortex 密度 N_v の計算に示されているように、 Ψ_i は一定の期間 SF オーダーコヒーレンスが保持されている。 $t \approx 100$ において、コヒーレンスを失い始めて、SF 状態は vortex 密度 N_v の増加に伴い破壊されていく。 $t \sim t_f$ での状態は、DW の局所ドメインを持つ状態と SF 状態の混合状態になっている相状態が実現される。この状態を、過冷却状態 (Supercooled state) と呼ぶことにする。それゆえ、 $t > t_f$ 後に観測される現象はガラス (glass) 転移に非常に類似した性質を持ち、クエンチ後に過冷却状態が進むにつれ、位相のコヒーレンスと SF 性が失われる。我々はこれを量子ガラス転移 (Quantum glass transition : QGT) と呼ぶ。一般的なガラス転移では温度がコントロールされる物理量なのに対して、QGT ではホッピング振幅 J がコントロールされる物理量となる。つまり、ここでの相転移は、熱相転移ではなく量子力学的相転移である。他の τ_Q の値 (例えば $\tau_Q = 20, 200$) でも同様な現象が観測されることを確認した。

ケース A と B の両方において観測される QGT は、非平衡現象である。それゆえ、次の問題としてガラス転移点 $J_g (< J_c)$ に類似した点があるかどうかを調べるのは興味深い問題である。 J_g 以下では、過冷却状態は準安定状態であるか、もしくは長寿命を持ち、SF 状態は位相コヒーレンスを失うことなく生き残るかである。ケース A と B では、 $J < J_g$ である。ケース C では、クエンチの終着点を $J(t = t_f) = 0.02$ 、つまり平衡状態での臨界点に非常に近い値に設定する (図 5.11 左)。 $\tau_Q = 50$ において得られたオーダーパラメータ $|\Psi|$ と vortex 密度 N_v を図 5.11 右に図示し、 Ψ_i の粒子密度や振幅 (SF 密度)、位相の時間発展を図 5.12 に図示した。

$t = 0$ において臨界点 $J = J_c$ を通過した後、図 5.12 の粒子密度のスナップショットに示さ

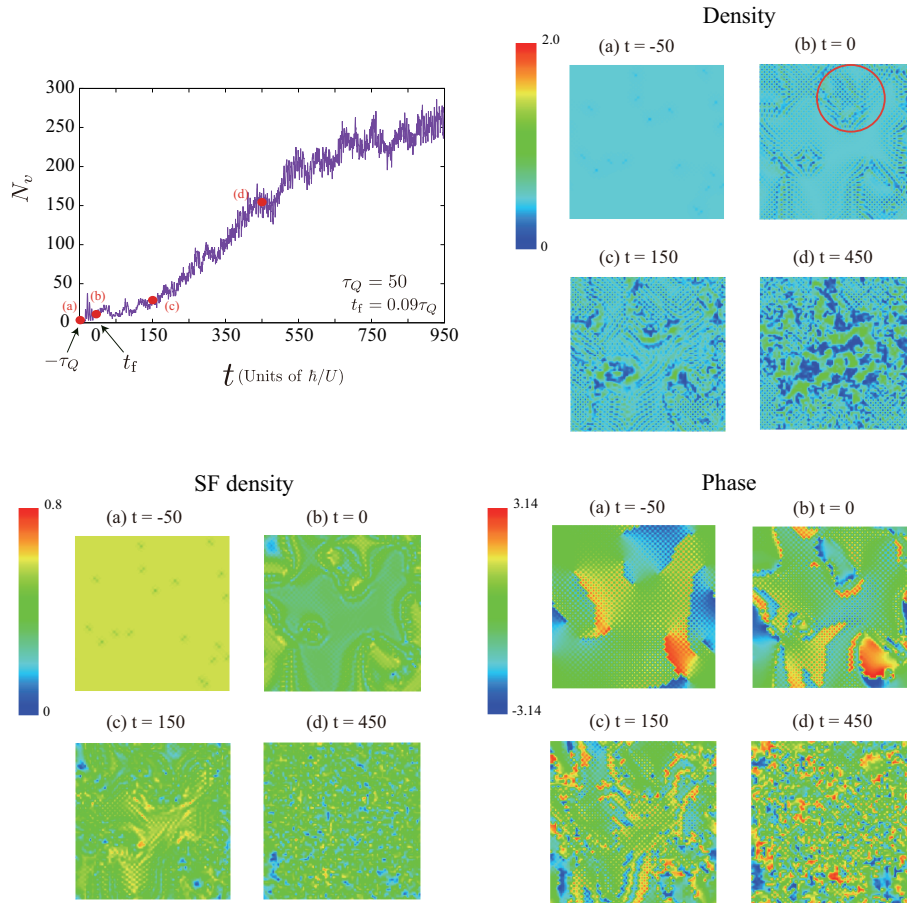


図 5.12: ケース C。(左上図) $\tau_Q = 50$ における vortex 密度 N_v の時間発展。図中には物理量の測定点 (a) $t = -50$ 、(b) $t = 0$ 、(c) $t = 150$ 、(d) $t = 450$ を図示している。(右上図) ケース C での粒子密度のスナップショット。 $t = 0$ において、赤丸内に DW ドメインが形成されている。(左下図) ケース C での SF オーダー振幅のスナップショット。(右下図) ケース C での SF オーダーパラメータの位相のスナップショット。

れているように、DW ドメインの形成が開始する一方、SF オーダーパラメータの長距離コヒーレンスが存在する。 $J(t_f) = 0$ と $J(t_f) = 0.01$ の場合を比較すると、SF の破壊と DW 領域の形成が遅いが、 $t > 450$ 以降に量子ガラス状態が形成され、局所 DW ドメインが発達するが、空の領域も形成され、SF オーダーは長距離コヒーレンスを失う。この結果は、 J_g を観測できないことを示している。同様の結果は、 $\tau_Q = 20, 200$ の場合で得られている。

5.3.2 揺らぎを含む初期状態

前小節で、SF 状態から DW 状態への系の時間発展ダイナミクスを調べた。そこでは、初期状態は Static GW 法によって得られた基底状態を用いた。1 次相転移を考慮している時に、動的現象が初期状態にどのように依存するかを調べることはとても興味深いことである。この問題を研究するために、完全な位相コヒーレンスを持つ SF 状態に微小な揺らぎを与えた状態を初期状態として考慮する。計算のために、一様分布 $[-0.005, 0.005] \times \pi$ から生成された乱数 $\{\delta\theta_i\}$ を持つ $\Psi_j = \sqrt{\rho} e^{i\delta\theta_j}$ に対応する GW 波動関数を用いる。他の条件は、ケース A と同じである (図 5.8 左を参照)。今回のケースをケース D と呼ぶ。我々は、t-GW 法を

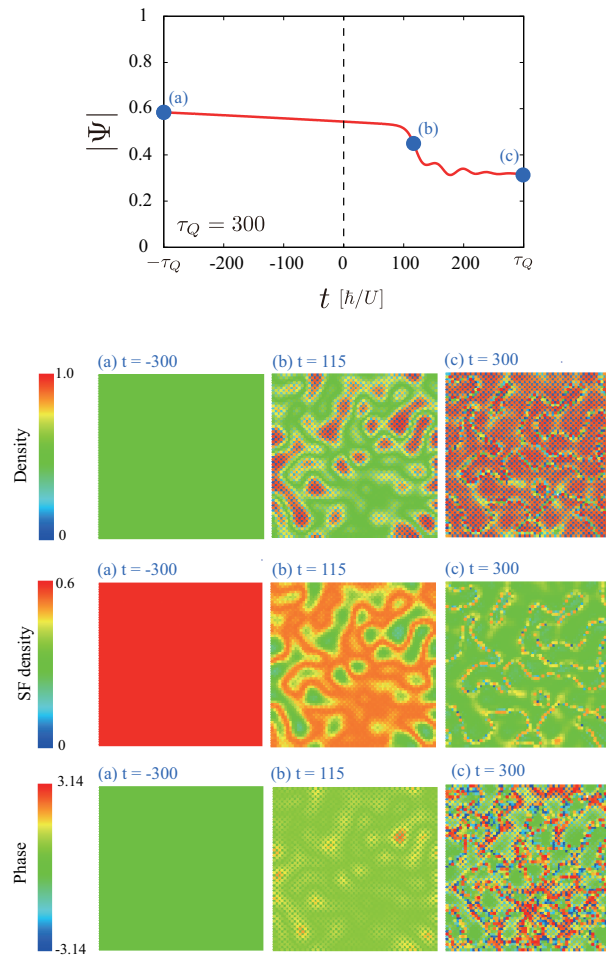


図 5.13: ケース D。(一番上図) $\tau_Q = 300$ における SF オーダーパラメータ振幅の時間発展。初期状態は Static GW 法で得られた状態に位相揺らぎを与えている。図中には物理量の測定点 (a) $t = -300$ 、(b) $t = 115$ 、(c) $t = 300$ を図示している。(二番目～四番目図) ケース D での各測定点での粒子密度スナップショット、SF オーダー密度スナップショット、SF オーダーパラメータ位相のスナップショットをそれぞれ示している。 $t = 300$ において、細いドメインウォールと共に大きな DW ドメインが形成されており、SF 位相のコヒーレンスは失われている。

用いて系の時間発展を調べ、図 5.13 に得られた結果を図示した。興味深いことに、臨界点 J_c を通過した後の系の振る舞いは、ケース A の振る舞いとは大きく異なる。SF オーダーパラメータ $|\Psi|$ は、 $t \sim 100$ で減少し、偶奇副格子の密度差が増加する。一方、vortex 密度は $t \sim 150$ で急激に増加し始める。図 5.13 に、粒子密度、SF 振幅、SF 位相のスナップショットを図示した。ケース A とは異なり、DW 領域は $t \sim 115$ で形成され始め、ドメインウォールが存在しているが、 $t \sim 300$ で系全体にまで発達することが分かる。[100] での古典的な 1 次相転移でも同様の振る舞いが観察されたことに注意する必要がある。一方、 $t < 115$ で SF 位相コヒーレンスが存在するが、 $t \sim 300$ で破壊される。ケース D の初期状態は、ケース A よりも高いエネルギーを持つ。上記の数値計算結果は、過冷却 SF 状態と真の DW 状態の間にエネルギー障壁が存在し、エネルギー障壁を超えるにはある程度のエネルギーが必要であることを示している。その上、上記の結果は大きな空間領域での SF 位相コヒーレンスの存在 (ケース A) が、大きなサイズの DW ドメインの形成を妨げることも示している。言い換えれば、SF コヒーレンスの局所的な変動が微小 (ケース D) であったとしても、クエンチ

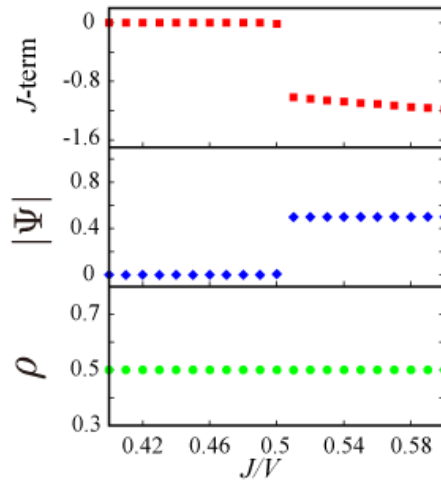


図 5.14: HCEBH モデルの Static GW 法によって得られた平衡状態物理量。ここでは平均密度 $\rho = 1/2$ 、 $V = 1$ としている。横軸は J/V 、縦軸は上からホッピングパラメータ J 項のみのエネルギー、SF オーダーパラメータ振幅 $|\Psi|$ 、平均密度 ρ を表している。この結果から、量子モンテカルロシミュレーション [103,104] で研究されているような 1 次相転移の存在を示している。

下で発達し、結果的に DW 状態が優位な状態となる。上記の興味深い現象は、近い将来、極低温原子系の実験で観測されることを期待している。

5.4 Hard-core Bose-Hubbard モデル

ここまでは、Soft-core ボソン ($n_c > 1$) での EBH モデルの研究を行った。各サイトに最大 1 粒子までしか占有できない Hard-core EBH(HCEBH) モデルも興味深いモデルであり、 $S = 1/2$ の量子スピンモデルとの関連しており、よく議論されている。正方格子での HCEBH モデルのハミルトニアンは、

$$H_{HC} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + H.c.) + V \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j - \mu \sum_i n_i \quad (5.4.1)$$

で与えられる。ここで、Hard-core 描像ではオンサイト相互作用項は存在しない。式 (5.4.1) のモデルの相図は、量子モンテカルロシミュレーションで研究されており [103,104]、DW 相と SF 相の half filling $\rho = 1/2$ 上では、soft-core の場合と同様に、1 次相転移が存在することを図 5.14 で確認した。その後、t-GW 法を用いて HCEBH モデルのクエンチダイナミクスについて調べる。相関長 ξ や vortex 密度 N_v 、 \hat{t} の τ_Q 依存性を図 5.15 に図示した。相関長 ξ や vortex 密度 N_v のスケーリング結果は、Soft-core の場合と比べると、揺らぎがより大きくなっていることが分かる。この振る舞いは、HCEBH モデルにおける各サイトの粒子数揺らぎが Soft-core に比べて小さいことから由来しており、結果、SF オーダーパラメータの位相自由度の安定性が弱まっていると考えられる。

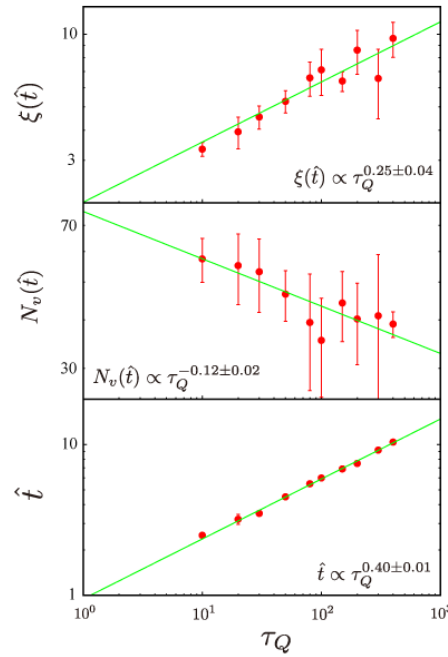


図 5.15: $\rho = 1/2$, $\tau_Q = 300$ における HCEBH モデルのクエンチダイナミクスによるスケーリング則。 $t = \hat{t}$ での相関長 $\xi(\hat{t})$ と vortex 密度 $N_v(\hat{t})$ のスケーリングは Soft-core の場合に比べて揺らぎが強い。この結果は、各サイトの粒子数揺らぎが Hard-core 条件のため制限されており、SF オーダーパラメータ Ψ_i の位相揺らぎが大きくなっていることが原因と考えられる。

5.5 まとめ

このセクションでは、t-GW を用いて 2 次元 EBH モデルの動的振る舞いについて調べた。基底状態では、SF、DW、SS の 3 つの相が存在する。特に、ホッピング振幅をゆっくりクエンチさせた時の SF と DW 間の 1 次相転移に注目した。

初めに、EBH モデルでの DW 相から SF 相への相転移のダイナミクスを調べる。数値計算では、オンサイトエネルギー U と NN 斥力相互作用 V は固定し、ホッピングパラメータ J を時間とともに変化させる。平衡臨界点 J_c を通過後、SF オーダーパラメータ振幅 $|\Psi|$ は $t = \hat{t}$ まで小さな値のままである。 $t = \hat{t}$ 後、 $|\Psi|$ は急速に増加する。それゆえ、 \hat{t} は frozen 領域から再び adiabatic 領域に入る時刻を意味する。しかし、ここで DW 相と SF 相間は 1 次相転移であることが注目する点である。 $t = t_{eq} (> \hat{t})$ において、 $|\Psi|$ が振動を始めて $t = t_{ex}$ まで振動する。この振る舞いは、MI 相から SF 相への 2 次相転移（我々の先行研究 [99]、第 4 章）での振る舞いと非常に類似している。そして、相関長や vortex 密度においてスケーリング則が存在するかどうかに興味を持った。我々の数値計算結果から、 $\xi \propto \tau_Q^b$ や $N_v \propto \tau_Q^{-d}$ のようなスケーリング則が成立することが明らかになった。この結果は、1 次相転移ではスケーリング則が存在しない、という予想に反した結果となっている。この理由として、緩和時間描像や（動的）臨界指数の概念がシンプルに適用されないためと考えられる。この結果から、KZM を超えるようなスケーリング則が生成される別の機構の存在を示唆していると考えられる。

後半では、我々は EBH モデルにおける SF 相から DW 相への相転移ダイナミクスを研究した。我々は、クエンチした時のホッピング振幅の最終値 $J(t_f)$ がクエンチ後の系のダイナミクスにどのような影響を及ぼすかについて調べた。その結果、とても興味深い現象を観察し

た。初めに、初期状態として GW 基底状態を用いる場合、 $\tau_Q = 300$ の非常にゆっくりしたクエンチにも関わらず、真の DW 状態は形成されない。代わりに、DW 相と SF 相ドメインの混合状態が現れ、クエンチ後は空間的な非一様状態が安定となる。 $J(t_f) > 0$ の場合、SF オーダーパラメータが $t = t_f$ で位相コヒーレンスを持っており、クエンチ後、SF オーダーは vortex の生成と共に弱くなっていく。そして、クエンチによって”supercooled 状態”が作られる。つまり、DW と SF 局所コヒーレント状態のドメイン構造が形成され、最終的には SF 状態は破壊される。この現象は古典ガラス転移に類似するため、量子ガラス転移 (QGT) と呼ぶこととした。

一方、SF 状態の位相に微小揺らぎを持たせた状態を初期状態としてクエンチを始めると、系はドメインウォールを持つ DW 状態に変化する。

図 5.2 に示されているような EBH モデルの相図の half filling 近傍では、SS 相が存在し、SS 相は DW 相と SF 相の相境界となっている。平均粒子数 $\rho = 1$ で強い NN 斥力相互作用 V の場合、SS 相の領域は大きくなり、SS 相と DW 相、SS 相と SF 相の 2 か所で 2 次相転移が存在する。2 つの 2 次相転移を通過するダイナミクスでは系がどのような発展をするかは興味深い。これに関して、いくつか関係する問題が近年古典系で研究され、修正された KZ スケーリング則が提案された [105]。我々は、次の章で上記の興味深い問題について調べていく。

第6章 複数の2次量子相転移が存在する クエンチダイナミクス

この章では、時間依存 Gutzwiller(t-GW) 法を用いて強い最近接 (NN) 斥力相互作用 V を持つ拡張 Bose-Hubbard(EBH) モデルのダイナミクスを研究する。単位 filling 近傍では、モデルの相図には Density-wave(DW) 相、Supersolid(SS) 相、超流動 (SF) 相の 3 相を有する。これら 3 つの相は、2 つの 2 次相転移によって分けられている。我々は、ハミルトニアン のホッピングパラメータ J を時間の関数 $J(t)$ として、クエンチダイナミクスについて調べる。DW 相から SS 相と DW 相から SF 相への相転移において、SF オーダーの形成、SF 相関長 や vortex 密度などのスケーリング則について注目をして研究を行っていく。スケーリング則の結果は、Kibble-Zurek 機構 (KZM) でのスケーリング則と比較する。一方、SF 相から DW 相では、ドメインウォールや vortex を有する DW 状態がどのように形成されるかに注目する。また、1 次相関を測定することで DW 領域での興味深い振る舞いを明らかにしていく。図 6.1 に、この章で議論・解明するキーワードを図示した。

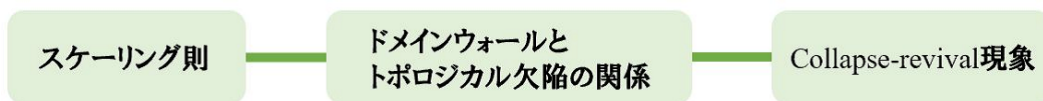


図 6.1: 第 6 章で議論・解明するキーワード群。

6.1 モデルと最近接斥力相互作用の強い場合の相図

ここでは、正方格子上的 EBH モデルや測定する物理量について説明をし、平衡状態での相図を示す。また、各相間の転移次数についても調べる。

6.1.1 拡張 Bose-Hubbard モデル

今回も前章同様 EBH モデルを用いる。

$$H_{EBH} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + H.c.) + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) + V \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j - \mu \sum_i n_i \quad (6.1.1)$$

ハミルトニアンの詳細は第 5 章参照。

今回の設定を以下に記す。考慮する系の平均粒子数 ρ は、単一 filling

$$\rho = \frac{1}{N_s} \sum_i \langle n_i \rangle = 1 \quad (6.1.2)$$

表 6.1: 各相の判別方法。SF オーダーパラメータ振幅 $|\Psi|$ 、DW オーダーパラメータ Δ_{DW} 、 Δ_{SF} が $= 0$ もしくは $\neq 0$ かで各状態相を判別できる。

	$ \Psi $	Δ_{DW}	Δ_{SF}
DW	0	$\neq 0$	0
SS	$\neq 0$	$\neq 0$	$\neq 0$
SF	$\neq 0$	0	0

となるようにする。ここで、 N_s は全サイト数を表し、 $N_s = 64 \times 64$ の周期境界条件を適用している。前章との大きな違いは、NN 斥力相互作用 V を $V = 0.375$ とし、unit filling $\rho \approx 1$ としている点である。これにより、相転移に含まれる状態相は DW 相、SS 相、SF 相となり、より豊富な現象が現れる。数値計算法である t-GW 法については、2.4.2 節を参照。相図を求める前に、相を区別するための物理量を準備する。この章で用いる主な物理量として、

$$\begin{aligned}\Psi_i &= \langle a_i \rangle & (6.1.3) \\ |\Psi| &= \frac{1}{N_s} \sum_i |\Psi_i| \\ \Delta_{DW} &= \frac{1}{N_s} \sum_i (-1)^i \langle n_i \rangle \\ \Delta_{SF} &= \frac{1}{N_s} \sum_i (-1)^i |\Psi_i|\end{aligned}$$

を定義する。 $(-1)^i$ は、偶数サイト（奇数サイト）において $+1(-1)$ を取る。 Ψ_i と $|\Psi|$ は SF オーダーを測定し、 Δ_{DW} は DW オーダーを測定する。 Δ_{SF} は相対パラメータと呼ばれ [106]、有限の Δ_{SF} は SS 相の存在を示す。各相の判別方法を表 6.1 に表す。

非平衡クエンチダイナミクスを調べる上で、これらの物理量の振る舞いは、とても重要な役割を果たす。

6.1.2 相図

ここでは、EBH モデルの平衡相図を示していく。このために、ハミルトニアン H_{GW} に対して時間依存しないシュレディンガー方程式を解く。図 6.2 に我々が得た $V/U = 0.375$ における相図を示し、Static GW 法で計算した相の識別で用いる物理量について図 6.3 に示した。

$V/U = 0.375$ において、3つの状態相が存在する。SF 相、DW 相、SS 相である。SS 相は、SF オーダーと DW オーダーの両方を併せ持っており、相図において SS 相は SF 相と DW 相の間に位置する。DW 相と SS 相、SF 相と SS 相、それぞれの相境界はどちらも 2 次相転移であることが図 6.3 から分かる。この結果は、量子モンテカルロ法を用いた結果 [107] と良い一致を見せている。ただし、SS 相の領域は量子モンテカルロ法での結果よりもわずかに大きくなっている。

以降の節では、図 6.2 の相図を元に、式 (6.1.1) ハミルトニアンのパラメータを時間変化させ、系が動的相転移を起こす時の振る舞いについて、つまり非平衡クエンチダイナミクスを研究する。数値計算において、エネルギー単位として $U = 1$ と固定する。第 5 章の研究 [108] では、 $V/U = 0.05$ における SS 相を形成しない $\rho \approx 0.5$ 近傍の領域を研究した。SS 相が無い

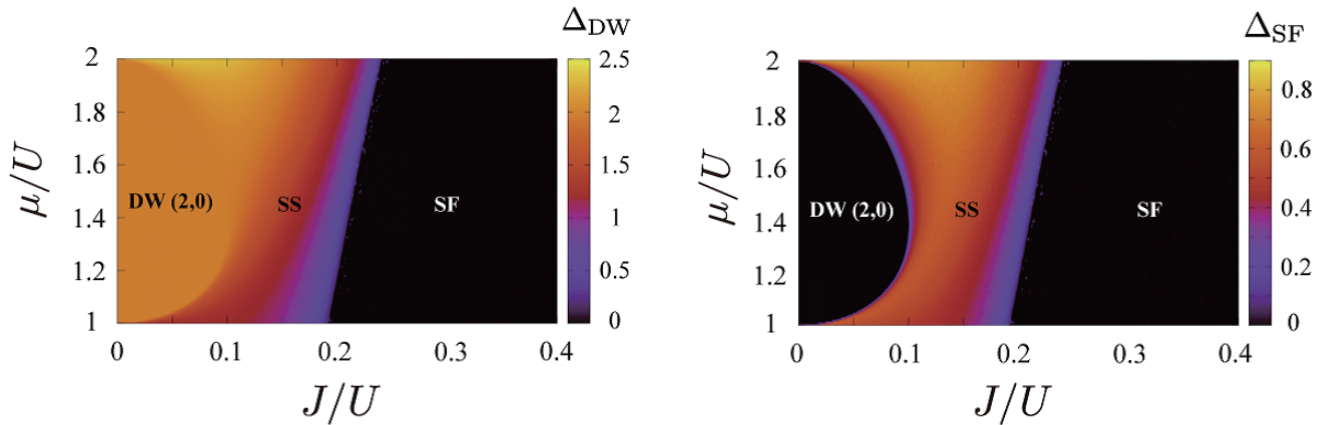


図 6.2: 単位 filling で $V/U = 0.375$ での EBH モデルの相図。この状態相には、(2,0) 型の DW 相、SS 相、SF 相が含まれている。それぞれの相間は 2 次相転移である。これについては、図 6.3 で確認をしている。それぞれの相での判定は、DW 相: $\Delta_{\text{DW}} \neq 0, \Delta_{\text{SF}} = 0, |\Psi| = 0$ 、SS 相: $\Delta_{\text{DW}} \neq 0, \Delta_{\text{SF}} \neq 0, |\Psi| \neq 0$ 、SF 相: $\Delta_{\text{DW}} = 0, \Delta_{\text{SF}} = 0, |\Psi| \neq 0$ である。

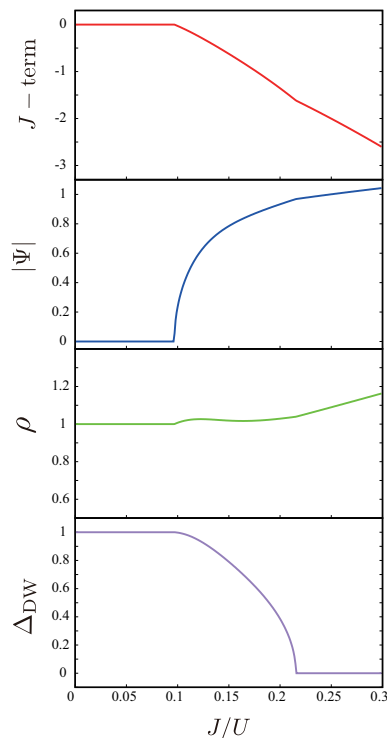


図 6.3: 図 6.2 でのそれぞれの臨界点近傍での物理量の様子。化学ポテンシャル $\mu/U = 1.5$ 、 $V/U = 0.375$ である。横軸は J/U 、縦軸は上からホッピング J 項 ($-\sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + H.c.)$) のみのエネルギー、SF オーダーパラメータ振幅 $|\Psi|$ 、平均密度 ρ 、DW オーダーパラメータ Δ_{DW} 。臨界点はそれぞれ左から、 $J_{c1}/U \simeq 0.10$ 、 $J_{c2}/U \simeq 0.22$ である。

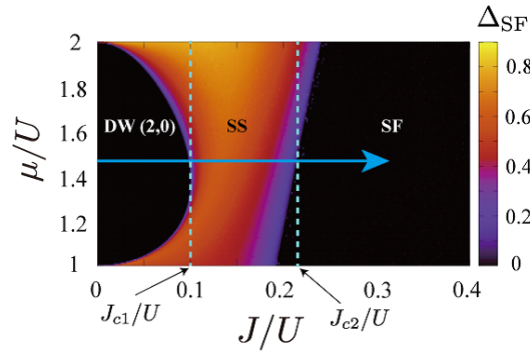


図 6.4: 矢印は DW 相から SS 相を通り SF 相へのクエンチダイナミクスのプロトコルを表す。 $\mu/U = 1.5$ であり、臨界点は DW-SS 間： $J_{c1}/U = 0.10$ 、SS-SF 間： $J_{c2}/U = 0.22$ である。

DW 相と SF 相間の境界は 1 次相転移となっていた。この章での研究は、複数の 2 次相転移を越えたとき、系がどのように振舞うか等に興味を持っている。次の節から、それぞれの 2 次相転移を動的クエンチした時の振る舞いについて調べていく。

6.2 DW 相から SS 相と DW 相から SF 相へのクエンチ

この節では、DW 相から SS 相と DW 相から SF 相への動的相転移を考える。図 6.4 の矢印で示しているのは、 $\mu/U = 1.5$ の平均粒子密度 $\rho \approx 1$ のラインであり、その時の DW 相は (2, 0) タイプ (粒子密度が 2,0,2,0,2,...) である。

DW 相から SS 相の臨界点は $J/U = J_{c1}/U \simeq 0.10$ であり、SS 相から SF 相の臨界点は $J/U = J_{c2}/U \simeq 0.22$ である。

6.2.1 DW 相から SS 相

まず初めに、DW 相から SS 相への動的相転移について調べていく。数値計算を行う上で、クエンチプロトコルを以下のように設定する。

$$\frac{J(t) - J_{c1}}{J_{c1}} = \frac{t}{\tau_Q}, t \in [-\tau_Q, \tau_Q] \quad (6.2.1)$$

これまで同様 τ_Q はクエンチ時間を表す。式 (6.2.1) でのプロトコルは、時刻 $t = 0$ において系が平衡状態での臨界点 J_{c1} を通過することを意味している。その後、クエンチは $t = \tau_Q$ で $J(\tau_Q) = 2J_{c1} (< J_{c2})$ まで進む。

図 6.5 に $\tau_Q = 300$ でのオーダーパラメータ $|\Psi|$ 、 Δ_{DW} 、 Δ_{SF} を時間の関数として図示している。

$|\Psi|$ は第 4 章での研究 [99] ($V/U = 0$ の Mott 絶縁体 (MI) 相から SF 相への動的相転移) の結果と類似な振る舞いとなっている。そこでの研究同様に、系が frozen 領域から adiabatic 領域に変化する時刻 \hat{t} を $|\Psi(\hat{t})| = 2|\Psi(0)|$ と定義する [95]。 t_{eq} も同様に $|\Psi|$ の振動が始まる時刻として定義した。 t_{eq} 以降の振動領域については第 4 章 [99] で説明をしている。 SF 振幅 $|\Psi|$ は \hat{t} から t_{eq} にかけて急激に増加している。一方、相関長自体はその領域で 2 倍程度にしかなっていない。長距離 SF コヒーレンスの本当の粗粒化過程は、 t_{eq} と t_{ex} の間で起こって

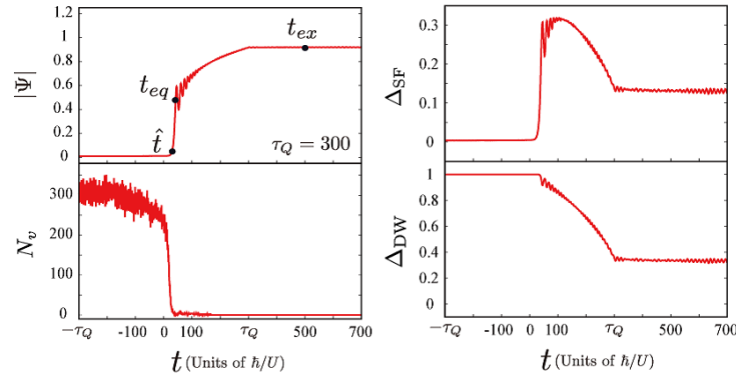


図 6.5: DW 相から SS 相へのクエンチダイナミクスでの物理量の時間発展。横軸はそれぞれ時間 t 、縦軸は左上から SF オーダーパラメータ振幅 $|\Psi|$ 、vortex 密度 N_v 、 Δ_{SF} 、DW オーダーパラメータ Δ_{DW} 。 $t = 0$ で系は平衡状態での DW→SS の臨界点を通る。図には \hat{t} 、 t_{eq} 、 t_{ex} を図示している。

いると考えられる。ここでの t_{ex} とは、 $|\Psi|$ の振動が落ち着いた時刻を表す。図 6.5 に図示されている Δ_{SF} 、 Δ_{DW} 、 N_v (定義は式 (4.2.2)、(6.1.4)) は、系が $t = \hat{t} (= 23.5)$ で SS 状態に変化していることを示している。この結果は、SF オーダーの断熱変化が $t = \hat{t}$ から始まることを意味している。

我々は、それぞれのクエンチ時間 τ_Q について SF 相関長や vortex 密度などの物理量がスケーリング則に従うかどうか非常に興味がある。ここで、SF 相関長 ξ と vortex 密度 N_v はこれまでと同一定義である (式 (4.2.2))。

DW 相から SS 相の相転移は 2 次相転移であるため、SF 相関長や vortex 密度が 3DXY モデルの臨界指数を持つスケーリング則に従うと予想できる。

しかし、今回の EBH モデルでは NN 斥力相互作用 V が含まれており、DW 相、SS 相ともに粒子数が非一様となっているために、そのまま 3DXY モデルの描像が適用できるかは明らかでない。つまり、スケーリング則の指数について考えたとき、指数 b を $\xi \propto \tau_Q^b$ 、指数 d を $N_v \propto \tau_Q^{-d}$ と定義した場合、単に $d = 2b$ という関係が成り立つかは非自明である。本節では、この問題に重点を置き調べていく。

スケーリング則の指数にどのような関係があるかについて見ていくために、 $t = \hat{t}$ と $t = t_{eq}$ におけるスケーリング則の結果を図 6.6 に図示した。

その結果から、 $\tau_Q = 20$ から $\tau_Q = 400$ において ξ と N_v は非常によいスケーリング則に従うことが分かる。それぞれの指数は、 $t = \hat{t}$ では $b = 0.32, d = 0.25$ 、 $t = t_{eq}$ では $b = 0.28, d = 0.50$ である。 $t = t_{eq}$ における vortex 密度は $t = \hat{t}$ に比べると小さい。そして、 $t = t_{eq}$ において vortex 間の相互作用は有効的に小さくなり、結果、 $t = t_{eq}$ で予想されている $d \approx 2b$ が成り立つ。

図 6.6 には、 \hat{t} と t_{eq} に対する τ_Q のスケーリング則も図示されている。2 次相転移を持つモデルでは、相関長臨界指数 ν と動的臨界指数 z を用いて KZ 仮説が $\hat{t}, t_{eq} \propto \tau_Q^{\nu z / (1 + \nu z)}$ と $\xi \propto \tau_Q^{\nu / (1 + \nu z)}$ と予想される。我々の結果から、 \hat{t} と t_{eq} での指数 ν, z はそれぞれ、 $\hat{t} \rightarrow \nu = 0.51, z = 1.18$ と $t_{eq} \rightarrow \nu = 0.40, z = 1.07$ である。得られた z の値は、3DXY モデルで期待される $z = 1$ にかなり近い値となっている。一方で、得られた ν の値は、3DXY モデルでの $\nu = 0.672$ [94] とは合わない。これは、DW 型の非一様さが SF オーダーの臨界点での振る舞いに影響を与

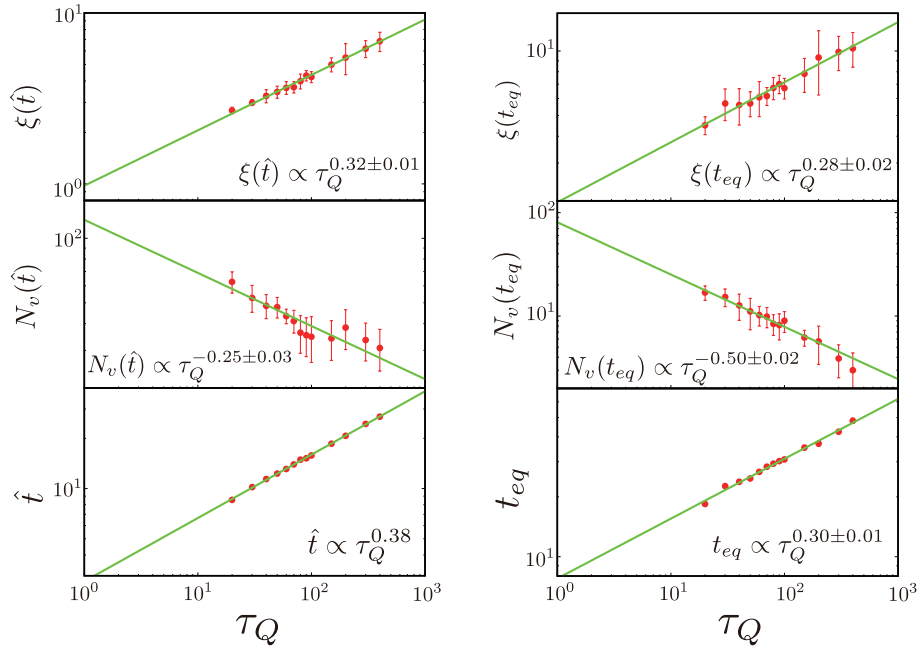


図 6.6: $t = \hat{t}$, $t = t_{eq}$ における τ_Q に対する相関長 ξ 、vortex 密度 N_v 、 \hat{t} 、 t_{eq} のスケーリング結果。誤差と共に指数の値を示している。左下の指数の誤差は、0.01 より小さい。

えているからと考えられる。上で行った計算の最後に、得られた指数が \hat{t} の正確な定義に過敏でないことを確認した。言い換えると、 \hat{t} から t_{eq} の期間では、 ξ と N_v について \hat{t} と t_{eq} で近い指数を持つスケーリング則が成り立つことを意味する。この結果は、その期間において SF 領域が崩壊せず成長することを表している [99, 108]。

6.2.2 DW 相から SF 相

次に DW 相から SS 相を通過し SF 相への動的相転移について考える。ここでのクエンチプロトコルは、

$$\frac{J(t) - J_{c1}}{J_{c1}} = \frac{t}{\tau_Q}, t \in [-\tau_Q, t_f] \quad (6.2.2)$$

と定義する。ここで $\tau_Q = 300$ におけるクエンチ終了時間 t_f を $t_f = 700$ と設定する。図 6.7 で、 $|\Psi|$ 、 Δ_{DW} 、 Δ_{SF} 、 N_v の時間発展の振る舞いを図示した。また、図 6.7 上部には Ψ_i の位相のスナップショットも示している。

DW オーダーパラメータ Δ_{DW} は $J/U \approx 0.1$ を越えた後、小さな振動を伴いながら滑らかに減少している。一方、SF オーダーパラメータ $|\Psi|$ は \hat{t} を通過後、急激に増加し、 Ψ_i の位相の粗粒化過程が t_{eq} から t_{ex} に起こる。 Δ_{SF} は SS 相の領域でのみ有限の値を持っている。図 6.7 での計算では、SS 相から SF 相へのクエンチダイナミクスが DW 相から SS 相へのクエンチダイナミクスと比べるとより滑らかに進むことが示されている。

クエンチ下、特に二つ目の臨界点 J_{c2} 通過後の相関長がどのように時間発展するかは興味深い。その結果を図 6.8 に図示した。

\hat{t} から t_{eq} において、相関長は 2 倍程度になるが、 Ψ_i の位相自由度の粗粒化過程の結果、 t_{eq} 以降では相関長が急激に増加する。図 6.8 の計算結果では、相関長は t が大きくなるにつれ

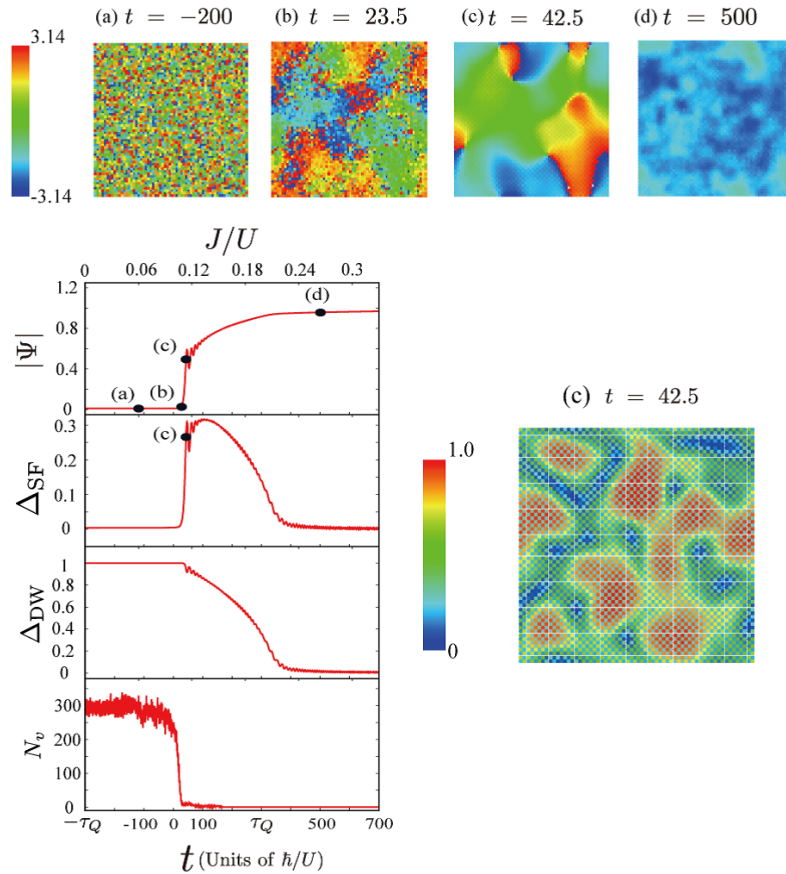


図 6.7: $\tau_Q = 300$ における DW 相から SS 相を通り SF 相へのクエンチダイナミクス。(上図) SF オーダーパラメータの位相スナップショット。 $t = 23.5$ は \hat{t} 、 $t = 42.5$ は t_{eq} 、 $t = 500$ は t_{ex} に対応している。(左下図) それぞれの物理量の時間発展。横軸は時間 t 、縦軸は上から SF オーダーパラメータ振幅 $|\Psi|$ 、 Δ_{SF} 、DW オーダーパラメータ Δ_{DW} 、vortex 密度 N_v 。(右下図) $t = t_{eq} = 42.5$ (SS 相) における $|\Psi_i|$ のスナップショットを表す。系は $J(t=0) = J_{c1}$ 、 $J(t=1.2\tau_Q) = J_{c2}$ で臨界点を通る。

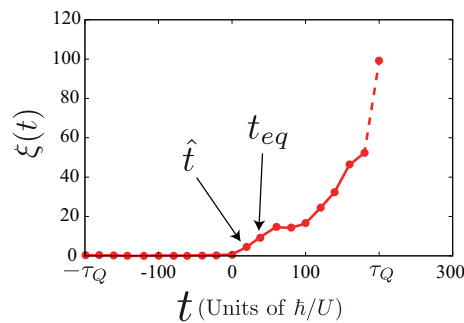


図 6.8: $\tau_Q = 200$ における SF 相関長の時間発展を表す。 $t = 0$ の後、 $\xi(t)$ は急激に増加する。(点線は相関長が系のサイズを超えていることを示している。) この結果は、有限温度 SF 状態が形成されていることを示している。

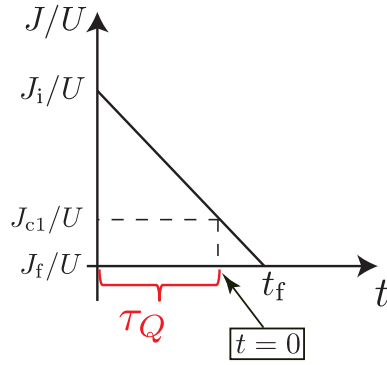


図 6.9: SF \rightarrow SS \rightarrow DW のクエンチダイナミクスのプロトコル。(J_i/U) = 0.3, (J_f/U) = 0 であり、 $J_{c1}/U = 0.10$ である。

て発散することを示唆している。この結果は、有限温度で一様な SF 状態が形成され、発散するコストリッツ・サウレス型の相関長を持つことを示す。すなわち、ホッピング振幅のクエンチが系にエネルギーを注入し、結果として、有限温度での平衡 SF 状態が実現されることが考えられる。

ここで、 \hat{t} の定義として先行研究 [95] での定義を採用している。図 6.7 や図 6.8 での数値計算結果は、 $t = \hat{t}$ で SF オーダーの断熱発展が始まることを表している。実際、SF オーダーパラメータの位相は図 6.7 にあるように、(b) $t = \hat{t}$ でコヒーレンスが現れる。SF オーダーの相関長も $t = \hat{t}$ で増加し始める。それゆえ、非断熱的な変化は $t = \hat{t}$ で終了すると考えるのが適切である。一方、 t_{eq} の定義はそれぞれの τ_Q について $|\Psi|$ の振る舞いから定義している。先行研究 [99] では、局所 SF ドメインの粗粒化過程が t_{eq} で始まることを説明しているが、今後粗粒化過程のより正確な研究が望まれる。

6.3 SF 相から SS 相を通り DW 相へのクエンチ

この節では、SF 相から SS 相を通り DW 相へクエンチした時の動的振る舞いについて調べていく。ここでは、第 4 章での 1 つの 2 次相転移を越えるのとは異なり、複数の 2 次相転移を越える場合を考慮する。今回のプロトコルは、

$$\frac{J_{c1} - J(t)}{J_{c1}} = \frac{J_i - J_{c1}}{J_{c1}} \frac{t}{\tau_Q}, t \in [-\tau_Q, t_f] \quad (6.3.1)$$

ここで、 $J_i = J(-\tau_Q)$ は $J(t)$ の初期値とし、 $J_i/U = 0.3 (> J_{c2}/U)$ とする。 $t = 0$ において $J(t=0) = J_{c1}$ であり、終着点の値を $J_f = J(t_f) = 0$ とする。つまり、クエンチ終了時刻は $t = t_f = \frac{J_{c1}}{J_i - J_{c1}} \tau_Q$ である。図 6.9 にクエンチプロトコルを図示している。

初期状態には、GW 法で求めた平衡時の基底状態に対して Ψ_i の位相に微小な揺らぎを加えた GW 型波動関数を用いている。完全にコヒーレントな位相を持つ真の SF 状態で時間発展を開始すると、DW-SF の不均質状態が形成される [108]。図 6.10 に DW-SF 不均質の最終状態を示している。

まず初めに、様々なクエンチ時間 τ_Q による $J(t)/U$ の関数とした時の SF 振幅 $|\Psi|$ を図 6.11 に図示した。上にあるように、 $J_{c1}/U \simeq 0.10$ 、 $J_{c2}/U \simeq 0.22$ である。 τ_Q が大きくなると、Static での結果に近づいていることが分かる。しかし全ての場合に見られるように、SF 振幅 $|\Psi|$ は $t \rightarrow t_f$ で有限の値を持つ。

また、様々な τ_Q における $t = t_f$ での密度分布にも興味がある。その結果を図 6.12 に示した。 $\tau_Q = 50, 200$ で、DW 領域を分断するドメインウォールが存在することが分かる。そして、

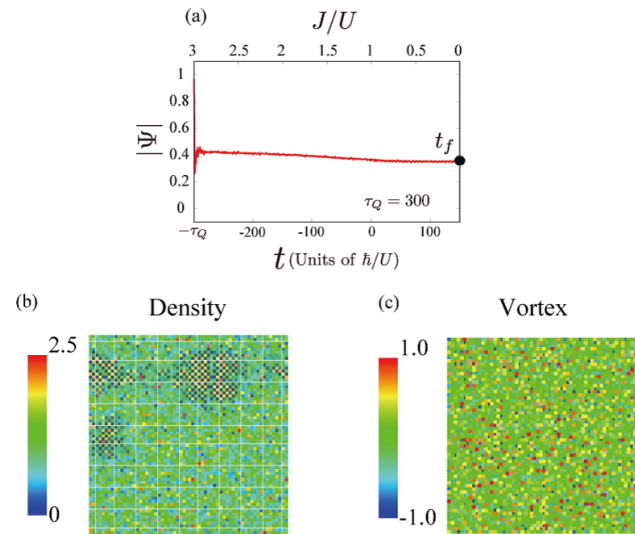


図 6.10: (a) SF オーダーパラメータ振幅 $|\Psi|$ の時間発展を表す。横軸に時間 t と J/U 、縦軸は $|\Psi|$ 。(b) 完全にコヒーレントな位相を持つ真の SF 状態で時間発展を始めると、DW 相転移を越えた後、DW-SF 混合状態が形成される。真の SF 状態からの時間発展の結果として形成される $t = t_f$ での DW と SF の混合状態のスナップショットを示している。密度分布は局所的な DW 領域の形成が見られる。(c) vortex のスナップショットは、vortex が非常に増加していることを表している。

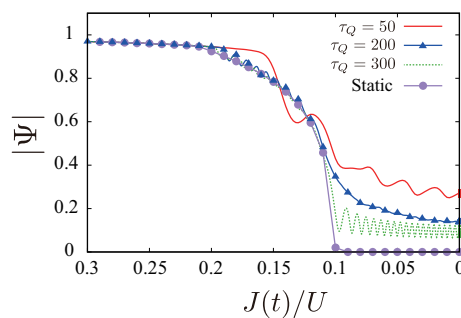


図 6.11: 様々なクエンチ時間 τ_Q における、 $J(t)/U$ の関数としての SF オーダーパラメータ振幅の変化。平衡状態時の結果と比較している。 τ_Q が大きくなるにつれて、平衡状態時の結果に近づいていることが分かる。

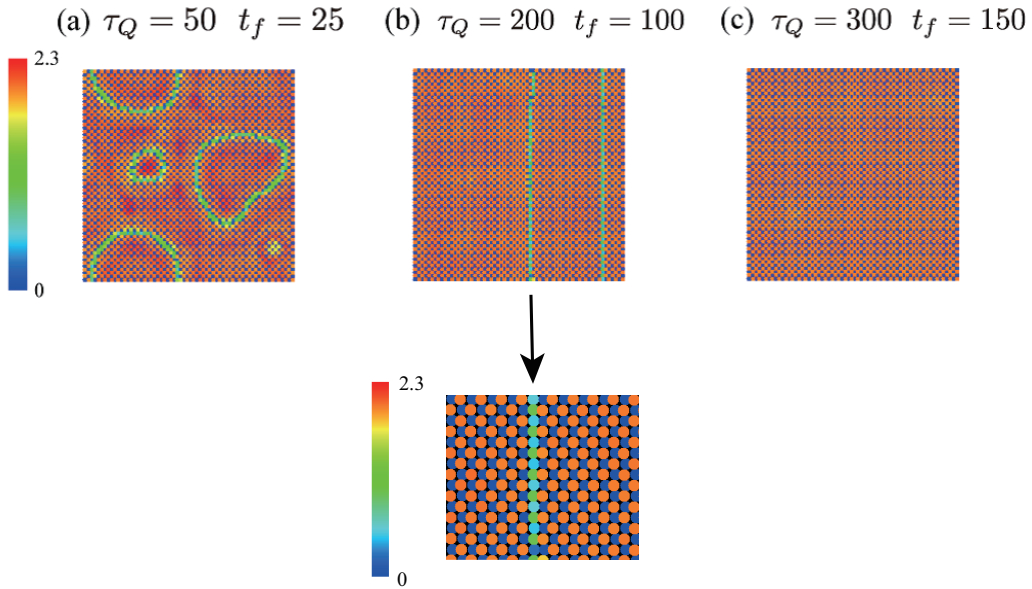


図 6.12: 様々なクエンチ時間 τ_Q における $t = t_f$ での密度分布。(a) $\tau_Q = 50, t_f = 25$ 、(b) $\tau_Q = 200, t_f = 100$ 、(c) $\tau_Q = 300, t_f = 150$ であり、 $J(t_f) = 0$ である。DW 領域を分断するドメインウォールが形成され、ドメインウォールの全ての長さは τ_Q が増加するにつれて減少する。

τ_Q が大きくなるにつれドメインウォールが減少することも分かる。

ドメインウォールをよく観察すると、DW のパターンがドメインウォールを横切ると変化し、ドメインウォールの各サイトでの粒子数期待値は揺らぎ、小数値を取る。これは、ドメインウォールの内部に強い量子揺らぎが存在することを意味する。

次に、 $\tau_Q = 300$ における物理量 $|\Psi|$ 、 Δ_{DW} 、 Δ_{SF} を時間の関数として図 6.13 に図示した。SF 位相コヒーレンスの詳細を調べるために、1 次相関

$$F_O = \frac{1}{2N_s} \sum_{i,j} (\langle a_i^\dagger a_j \rangle + c.c.) \quad (6.3.2)$$

を定義し計算していく。 $\tau_Q = 300$ での F_O の計算結果を図 6.13 に図示している。 $t = 0$ 通過後、 F_O は振動しており、詳しく観察すると振動領域での周期が $T \approx 1$ となっている。図 6.14 に $\tau_Q = 50, 200, 300$ における F_O の計算結果を図示している。

どのクエンチ時間 τ_Q においても、 $t \approx 0$ を越えた後 F_O が振動することが分かる。しかし、振動パターンは τ_Q に強く依存している。この振る舞いは、先行研究 [54, 89, 98, 109–111] にあるような SF の位相コヒーレンスが生き残っていることに由来する collapse-revival 現象と関係があると考えられる。実際、真のコヒーレント状態 $|SF\rangle = \prod_i |\rho_i, \theta_i\rangle$ (ここで、 $a_i |\rho_i, \theta_i\rangle = \sqrt{\rho_i} e^{i\theta_i} |\rho_i, \theta_i\rangle$) と F_O の積を計算する [109] と、

$$\begin{aligned} & \langle SF | e^{iH_{DW}t} a_i^\dagger a_j e^{-iH_{DW}t} | SF \rangle \\ & \propto \sqrt{\rho_i \rho_j} e^{i(\theta_j - \theta_i)} \exp\{\rho_i (e^{itU} - 1) + \rho_j (e^{-itU} - 1)\} \\ & \quad \times \exp\{\rho_k (e^{itV} - 1) + \rho_\ell (e^{-itV} - 1)\}, \end{aligned} \quad (6.3.3)$$

となる。ここで、 H_{DW} は

$$H_{DW} = \frac{U}{2} \{n_i(n_i - 1) + n_j(n_j - 1)\} + V(n_i n_k + n_j n_l) \quad (6.3.4)$$

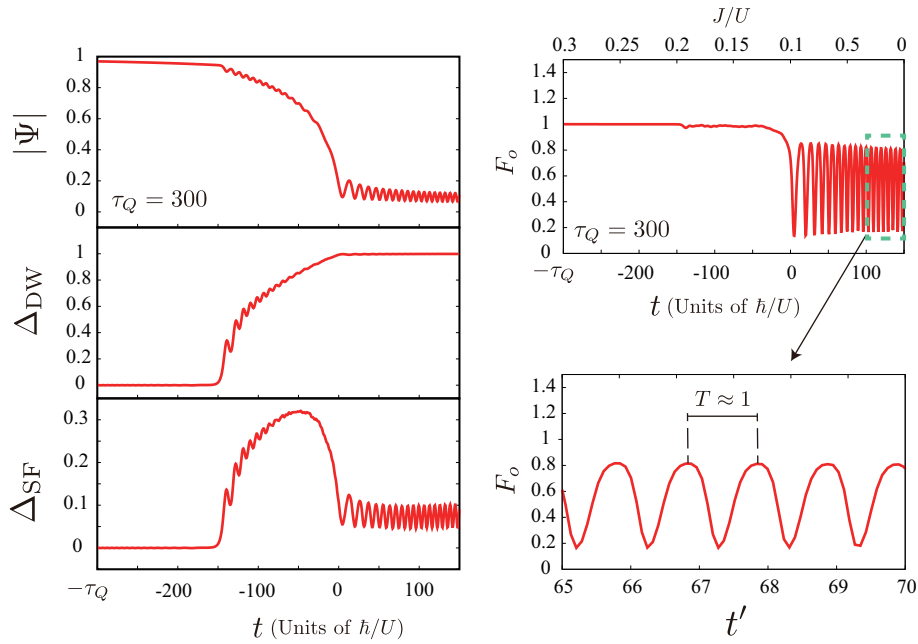


図 6.13: (左図) $\tau_Q = 300$ における SF オーダーパラメータ振幅 $|\Psi|$ 、DW オーダーパラメータ Δ_{DW} 、 Δ_{SF} の時間発展。(右図) 1 次相関 F_0 の時間発展の様子。 $t = 0$ を通過後、collapse-revival 現象が見られる。右下の横軸 t' は $t' \equiv t \times \frac{U}{2\pi}$ と定義している。 $J(t = 0)/U = J_{c1}/U$ 、 $J(t = -150)/U \approx J_{c2}/U$ 。

$\rho_i, \rho_j \gg \rho_k, \rho_l$ のような DW 型の構造では、式 (6.3.3) においてオンサイト相互作用項 U が NN 斥力相互作用項 V より支配的になる。そして、振動周期は近似的に $2\pi/U$ で与えられる。これは図 6.13 のキャプションで説明している。

上記の予想を検証するために、様々な τ_Q の場合を調べ、 $J/U \approx 0$ での F_0 や vortex 分布について図 6.14 に図示している。 $\tau_Q = 50, 200$ において、非常に明確なドメインウォールが存在し、興味深いことに、これらのドメインウォール上には大量の vortex が存在することが分かる。それゆえに、SF 位相コヒーレンスは破壊されている。一方 $\tau_Q = 300$ では、ドメインウォールの存在はそれほど明確ではなく、vortex の数は少なく、非常にランダムに位置していることが分かる。これが F_0 での振動の起源であると予想される。まとめると、SF 相から DW 相へのゆっくりなクエンチでは、SF 振幅 $|\Psi|$ は徐々に小さくなるが、vortex 分布や一次相関 F_0 から分かるように速いクエンチに比べて SF 位相コヒーレンスは徐々に強くなっている。

6.4 まとめ

この章では、正方格子上の強い NN 斥力相互作用 V をもつ EBH モデルについて研究を行ってきた。初めに、単位 filling 近傍で $V/U = 0.375$ という強い NN 斥力相互作用を持つ系の相図を明らかにした。相図には 3 つの相 (DW 相、SS 相、SF 相) が存在する。その後、我々はホッピング振幅を時間の関数として様々なクエンチ時間 τ_Q で非平衡クエンチダイナミクスを調べていく。

DW 相から SS 相へのクエンチダイナミクスでは、SF 振幅の時間発展を観測して、その振る舞いが MI 相から SF 相への 2 次相転移での振る舞いと類似していることを明らかにした。SF オーダーの相関長や vortex 密度、 \hat{t} 、 t_{eq} から物理量のクエンチ時間 τ_Q に対するスケーリング

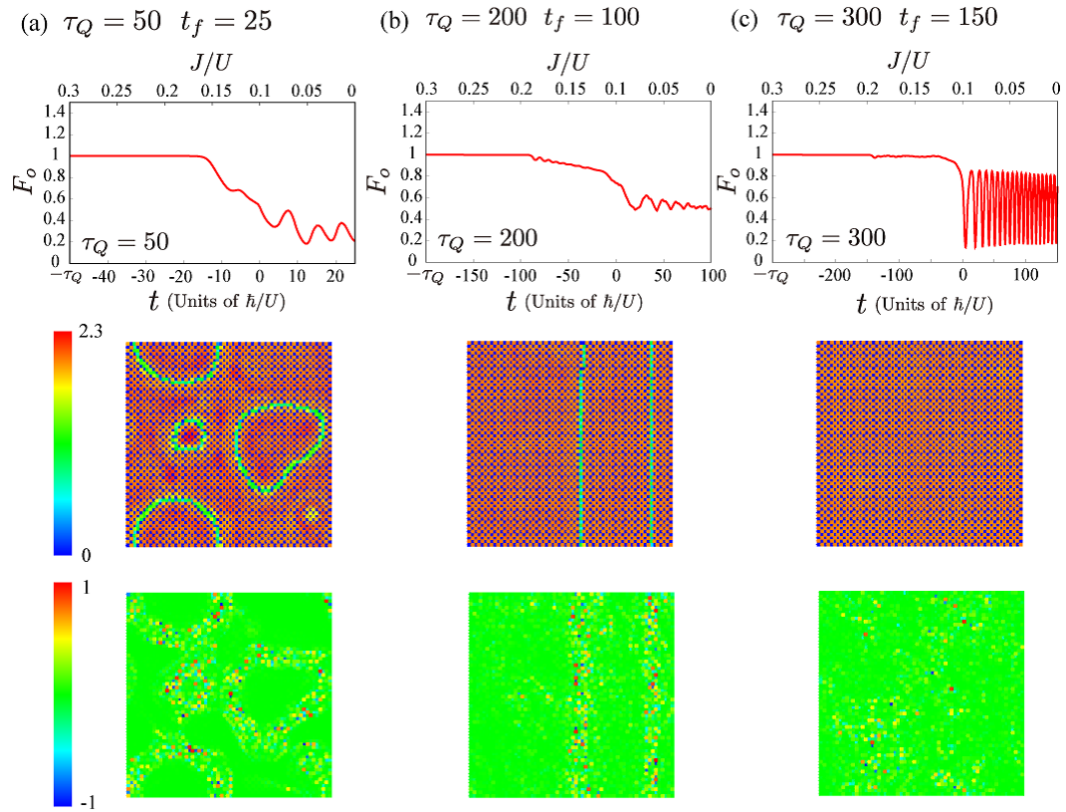


図 6.14: (上図) $\tau_Q = 50, 200, 300$ における 1 次相関 F_O の時間発展。 t_f は図 6.9 にあるようにクエンチの終時間を表す。(中央図) それぞれ $t = t_f$ での密度分布スナップショット。(下図) それぞれ $t = t_f$ での vortex 分布スナップショット。 $\tau_Q = 50, 200$ において、どちらも形状は異なるが明確なドメインウォールが形成されていることが分かる。また、vortex はドメインウォール上に位置していることも分かる。一方、 $\tau_Q = 300$ では vortex 分布はランダムになっている。

則を示した。KZ スケーリング仮説を用いることで、我々の数値計算結果から臨界指数 ν と z の値が推測された。そして、動的臨界指数 z は 3DXY モデルの値と近い値となったが、数値計算で得られた相関長臨界指数 ν は 3DXY モデルの値とは合わない。この不一致は、強い NN 斥力相互作用と DW オーダーから由来すると考えられる。

次に、DW 相から SS 相を通り SF 相までのクエンチダイナミクスを調べた。我々は、SF オーダーパラメータの位相自由度が、MI 相から SF 相への相転移と同様の粗粒化過程を経ることを確認した。SF オーダーの相関長も測定し、SF 領域では t が大きくなるにつれて発散することを見出した。これはクエンチによるエネルギー注入の結果、有限温度での SF 状態を形成していることを意味する。一方、DW オーダーは SS 領域への転移点を越えた後、徐々に減少し、SF 領域への転移で消滅する。

最後に、SF 相から SS 相を通り DW 相へ向かうクエンチダイナミクスを調べた。 $\tau_Q = 300$ において、SF 振幅は SF 相から SS 相への転移点 J_{c2} で減少を始め、SS 相から DW 相への臨界点を越えた後、振動を見せる。そこで、SF 位相コヒーレンスを調べるために 1 次相関 F_0 を観察した。その結果、DW 領域において SF 位相コヒーレンスが生き残っていることに由来する collapse-revival 現象が見られた。同様な現象は、先行研究 [89, 99, 109] で SF-MI クエンチダイナミクスにおいて議論されている。

我々は、ここで調べた現象が冷却原子の実験において近い将来観測されることを期待している。 ^{168}Er ボソンは、双極子モーメントが $7\mu_B$ ($\mu_B =$ ボーア磁子) であり NN 斥力相互作用が非常に大きいため、EBH モデルの量子シミュレーションの候補であると考えられる。先行研究 [112] において、光学格子上の ^{168}Er 系を研究し、 $V/U \approx 0.3$ の EBH モデルが実現可能であることを示した。その上、 ^{168}Er 系での関連する実験が行われており、DW オーダーでの基底状態の観測が報告された [113]。

第7章 まとめと総括

最後にまとめと総括を行う。

本博士論文では、光学格子中の極低温原子系における動的量子相転移について研究を行ってきた。今回用いたモデルは、光学格子中極低温原子系の振る舞いを記述する2次元 Bose-Hubbard(BH) モデル、2次元拡張 BH(EBH) モデルである。このモデルは、実験において実現されており、非常に注目を集めているモデルで、多くの研究がなされている。数値計算手法としては、2次元系において有効な Gutzwiller(GW) 法とそれに時間依存を含ませた時間依存 Gutzwiller(t-GW) 法を用いている。1次元系では、より厳密な数値計算手法が存在する(時間依存密度行列繰り込み群、time-evolving-block decimation 等) 一方、2次元系ではこれらに対応する数値計算手法は存在しない。その為、平均場近似を用いているものの2次元系に適用でき、幅広い領域で適用でき実験結果を良く記述する GW(t-GW) 法を用いた。

第4章では、Mott 絶縁体 (MI) 相から超流動 (SF) 相への2次量子相転移のクエンチダイナミクスについて物理的描像を得た。最初に先行研究 [86] の実験で調べられた相関長の指数と我々の数値シミュレーションで得られた指数の値が良い一致を見せることを確認し、シミュレーションの有効性を調べた。そして、Kibble-Zurek 機構 (KZM) によるスケーリング仮説と [86] の実験および数値シミュレーション結果との間のズレの原因が測定点にあることも指摘した。次に、KZ 仮説に従うプロトコルを用いて、t-GW 法により時間依存シュレディンガー方程式を解くことで、クエンチされた BH モデルの動的振る舞いを調べた。BEC の振幅が興味深い振る舞いをすることを示し、KZM で予想されている \hat{t} を超えた後にも重要な時間スケール t_{eq}, t_{ex} が存在することも示した。時間スケール t_{eq} の存在は先行研究 [95] で議論されており、 \hat{t} から t_{eq} 間で BEC の振幅が急激に増加している。一方、 t_{eq} から t_{ex} 間で BEC 振幅は強く振動する。これらの振る舞いを理解するために、BEC オーダーパラメータの局所振幅、局所位相、そして vortex 密度を計算した。 \hat{t} から t_{eq} の間、BEC 振幅が急激に増加するにもかかわらず、滑らかな粗粒化過程が起こることが分かった。この期間とは対照的に、 t_{eq} から t_{ex} に至るまで強い粗粒化過程が起こっていることが明らかとなり、その物理的描像を得た。

また、我々は KZ スケーリング則が成り立つかについて、クエンチ時間 τ_Q の関数として相関長と vortex 密度を計算した。その結果、我々は \hat{t} と t_{eq} における相関長の指数 (b) と vortex 密度の指数 (d) をそれぞれ得て、それらがとても近い値を取ることを明らかにした。この結果は、 \hat{t} から t_{eq} 間の BEC の時間発展は phase-ordering 過程の観点から非常に滑らかであるという様な物理的描像を支持する結果である。我々が得た他の重要な観測結果として、クエンチ時間が非常にゆっくりになると ($\tau_Q \rightarrow \infty$)、 $t = \hat{t}$ における vortex 密度は単純なスケーリング則には従わなくなることが分かった。これは、 \hat{t} が大きくなるにつれて、 $J(\hat{t}) \rightarrow J_c$ となることが原因と考えられる。さらに、クエンチ後の状態がドメイン構造を有しているので、 t_{ex} 後にどのように系が時間発展するかを観察した。このドメイン構造は長時間残っているが、最終的には系は一様状態に落ち着いたことが分かり、この状態が平衡状態であると考えられる。最後にこの現象を観測するための実験セットアップについて述べ、今後の実験で確認されることを期待する。

第5章では、SF相とDensity-wave(DW)相間の1次相転移を有するEBHモデルを用いてクエンチダイナミクスを研究した。初めに、EBHモデルでのDW相からSF相への相転移ダイナミクスを調べた。数値計算では、オンサイトエネルギー U とNN斥力相互作用 V は固定し、ホッピングパラメータ $J(t)$ を時間とともに変化させた。

SFオーダーパラメータ振幅 $|\Psi|$ の振る舞いは、MI相からSF相への2次相転移 [99] での振る舞いと非常に類似している。しかし、ここでDW相とSF相間は1次相転移であることが注目する点である。そして、相関長やvortex密度のスケーリング則が存在するかどうかに興味を持った。我々の数値計算結果から、 $\xi \propto \tau_Q^b$ や $N_v \propto \tau_Q^{-d}$ のようなスケーリング則が成立することを示した。この結果は、1次相転移ではスケーリング則が存在しない、という予想に反した結果となっている。このような結果になった理由として、緩和時間描像や(動的)臨界指数の概念がシンプルに適用されないためと考えられる。今回の結果から、KZMを超えるような、スケーリング則が生成される別の機構の存在を示唆していると考えられる。

後半では、EBHモデルにおけるSF相からDW相への相転移ダイナミクスを調べた。我々は、クエンチした時のホッピング振幅の最終値 $J(t_f)$ がクエンチ後の系のダイナミクスにどのように影響を及ぼすかを調べた。

初めに、初期状態としてGW基底状態を用いる場合、 $\tau_Q = 300$ の非常にゆっくりのクエンチにも関わらず、真のDW状態は形成されることが分かった。代わりに、DW相とSF相ドメインの混合状態が現れ、クエンチ後は空間的な非一様状態が安定となる。 $J(t_f) > 0$ の場合、SFオーダーパラメータが $t = t_f$ で位相コヒーレンスを持っており、クエンチ後、SFオーダーはvortexの生成と共に弱くなっていく。そして、クエンチによって”supercooled状態”が作られた。つまり、DWとSF局所コヒーレント状態のドメイン構造が形成される。その後、クエンチの最後にはSF状態は破壊される。この現象は古典ガラス転移に類似するため量子ガラス転移(QGT)と呼ぶことにした。

一方、一様SF状態の位相に微小揺らぎを持たせた状態を初期状態としてクエンチを始めると、系はドメインウォールを持つDW状態に変化することが明らかとなった。この結果は、古典的な1次相転移での振る舞い [100] に類似していることも分かった。これらの結果から、SF位相コヒーレンスが強い場合、DWドメインの形成を妨げるため、DWドメインの形成には、位相の微小揺らぎが重要になると考えられる。最後に、Hard-core BHモデルを用いて、Soft-core BHモデルとの比較を行った。その結果、Soft-coreの場合と比べて粒子数揺らぎが小さいため、SFオーダーの位相が大きく揺らいでいることが分かった。

第6章では、強いNN斥力相互作用 V をもつEBHモデルを用いて、複数の2次量子相転移ダイナミクスについて研究を行った。ここでは、DW相、Supersolid(SS)相、SF相の3つの状態相が存在し、それぞれの相間は2次相転移である。

まず、DW相からSS相へのクエンチダイナミクスでは、SFオーダーの相関長やvortex密度、 \hat{t} 、 t_{eq} ら物理量のクエンチ時間 τ_Q に対するスケーリング則を示した。KZスケーリング仮説を用いることで、我々の数値計算結果から臨界指数 ν と z の値が推測することができた。そして、動的臨界指数 z は3DXYモデルの値と近い値となったが、数値計算で得られた相関長臨界指数 ν は3DXYモデルの値とは合わなかった。この不一致は、強いNN斥力とDWオーダーから由来すると考えられる。

次に、DW相からSS相を通りSF相までのクエンチダイナミクスでは、SFオーダーパラメータの位相自由度が、MI相からSF相への相転移と同様の粗粒化過程を起こすことを確認した。

最後に、SF相からSS相を通りDW相へ向かうクエンチダイナミクスを調べた。 $\tau_Q = 300$ において、SF振幅はSF相からSS相への転移点 J_{c2} で減少を始め、SS相からDW相への臨界点を越えた後、振動を見せる。SF位相コヒーレンスを調べるために1次相関 F_0 を観測し、

DW 領域で SF 位相コヒーレンスが生き残っていることに由来する collapse-revival 現象が見られた。最後に強い双極子モーメントを持つ ^{168}Er ボソンを用いた実験のセットアップを示した。

近年、極低温原子系での非平衡クエンチダイナミクスは多くの研究者が興味を持ち活発に研究されている。本博士論文では、非平衡クエンチダイナミクスについての新たな知見を与えることができたと考えており、今後更なる発展に期待する。

謝辞

この6年間、本研究を通して熱心にご指導下さった一瀬郁夫教授には心から感謝申し上げます。常に気を遣っていただいたお蔭で、研究を楽しく行うことができ、議論の時間を非常に多く割いていただき良い研究成果が出せたと実感しています。また、研究以外の面でも多大な支援をしていただきました。特に、博士課程における経済面では、名古屋工業大学のリサーチアシスタントの機会を頂いたことに非常に感謝しております。

本研究では、一瀬研究室の方々特に、久野義人博士、平野貴弘氏、Park Jonghoon 氏らには大変お世話になりました。共同研究として多大な貢献とサポートをしていただき感謝しております。

これまでの一瀬研究室のメンバーである、森崇将氏、河木啓真氏、加藤良祐氏、早川晃弘氏、折戸隆弘氏をはじめ、卒業された方々含めて研究以外の面でもお世話になりました。

最後に、これまで支え暖かく見守ってくれた両親に深い感謝をします。

References

- [1] R. Feynman, *Int. J. Th. Phys.* **21**, 467 (1982)
- [2] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 885 (2008)
- [3] I. Bloch, J. Dalibard, and S. Nascimbene, *Nature Phys.* **8**, 267 (2012)
- [4] S. Trotzky, L. Pollet, F. Gerbier, U. Schnorrberger, I. Bloch, N. Prokof'ev, B. Svistunov, and M. Troyer, *Nature Phys.* **6**, 998 (2010)
- [5] B. P. Lanyon, C. Hempel, D. Nigg, M. Müller, R. Gerritsma, F. Zähringer, P. Schindler, J. T. Barreiro, M. Rambach, G. Kirchmair, M. Hennrich, P. Zoller, R. Blatt, and C. F. Roos, *Science* **334**, 57 (2011)
- [6] S. Chu, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 685 (1998)
- [7] C. N. Cohen-Tannoudji, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 707 (1998)
- [8] W. D. Phillips, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 721 (1998)
- [9] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* 2nd ed., Cambridge University Press (2008)
- [10] W. D. Phillips, P. L. Gould, and P. D. Lett, *Science*, **239**, 878 (1988)
- [11] C. S. Adams and E. Riis, *Prog. Quant. Electron*, **21**, 1 (1997)
- [12] E. P. Gross, *Nuovo Cimento* **20**, 454 (1961)
- [13] L. P. Pitaevskii, *Sov. Phys. JETP* **13**, 451 (1961)
- [14] 坪田誠・笠松健一・小林未知数・竹内宏光、「量子流体力学」(丸善出版 2018)
- [15] W. Ketterle, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 1131 (2002)
- [16] M. Greiner, PhD Thesis, *Ultracold quantum gases in three-dimensional optical lattice potentials.*, Ludwig-Maximilians-Universität München (2003)
- [17] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Nature* **415**, 39 (2002)
- [18] M. Endres, M. Cheneau, T. Fukuhara, C. Weitenberg, P. Schauss, C. Gross, L. Mazza, M.-C. Bañuls, L. Pollet, I. Bloch, and S. Kuhr, *App. Phys. B* **113**, 27 (2013)
- [19] W. S. Bakr, A. Peng, M. E. Tai, R. Ma, J. Simon, J. I. Gillen, S. Fölling, L. Pollet, and M. Greiner, *Science* **329**, 547 (2010)

- [20] E. Haller, J. Hudson, A. Kelly, D. A. Cotta, B. Peaudecerf, G. D. Bruce, S. Kuhr, *Nature Phys.* **11**, 738 (2015)
- [21] W. S. Bakr, J. I. Gillen, A. Peng, S. Fölling, and M. Greiner, *Nature* **462**, 74 (2009)
- [22] C. Weitenberg, M. Endres, J. F. Sherson, M. Cheneau, P. Schauß, T. Fukuhara, I. Bloch, and S. Kuhr, *Nature* **471**, 319 (2011)
- [23] M. Greiner and S. Fölling, *Nature* **453**, 736 (2008)
- [24] P. Soltan-Panahi, J. Struck, P. Hauke, A. Bick, W. Plenkers, G. Maineke, C. Becker, P. Windpassinger, M. Lewenstein, and K. Sengstock, *Nature Phys.* **7**, 434 (2011)
- [25] P. Soltan-Panahi, D-S. Lühmann, J. Struck, P. Windpassinger, and K. Sengstock, *Nature Phys.* **8**, 71 (2011)
- [26] J. Struck, C. Ölschläger, R. Le Targat, P. Soltan-Panahi, A. Eckardt, M. Lewenstein, P. Windpassinger, and K. Sengstock, *Science* **333**, 996 (2011)
- [27] G-B. Jo, J. Guzman, C. Thomas, P. Hosur, A. Vishwanath, and D. Stamper-Kurn, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 045305 (2012)
- [28] L. Tarruell, D. Greif, T. Uehlinger, G. Jotzu, and T. Esslinger, *Nature* **483**, 302 (2012)
- [29] M. Aidelsburger, M. Atala, S. Nascimbène, S. Trotzky, Y.-A. Chen, and I. Bloch, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 255301 (2011)
- [30] J. Struck, C. Ölschläger, M. Weinberg, P. Hauke, J. Simonet, A. Eckardt, M. Lewenstein, K. Sengstock, P. Windpassinger, *Phys. Rev. Lett.* **108** 225304 (2012)
- [31] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039 (1998)
- [32] R. Peierls and N. F. Mott, *Proc. Phys. Soc.* **49**, 72 (1937)
- [33] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, **276**, 238 (1963)
- [34] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **40**, 546 (1989)
- [35] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions.*, Cambridge University Press (1999)
- [36] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3108 (1998)
- [37] R. Grimm, M. Weidemüller, and Y. B. Ovchinnikov, *Adv. At., Mol., Opt. Phys.*, **42**, 95 (2000)
- [38] P. Navez and R. Schützhold, *Phys. Rev. A* **82**, 063603 (2010)
- [39] C. N. Yang, *Rev. Mod. Phys.* **34**, 694 (1962)
- [40] K. Sheshadri, H. R. Krishnamurthy, R. Pandit, and T. V. Ramakrishnan, *Europhys. Lett.* **22**, 257 (1993)

- [41] M. Jreissaty, J. Carrasquilla, F. A. Wolf, and M. Rigol, *Phys. Rev. A* **84**, 043610 (2011)
- [42] L. Amico and V. Penna, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2189 (1998)
- [43] 西森秀稔、「相転移・臨界現象の統計物理学」(培風館 2005)
- [44] 宮下精二、「ゆらぎと相転移」(丸善出版 2018)
- [45] J. Carrasquilla, S. R. Manmana, and M. Rigol, *Phys. Rev. A* **87**, 043606 (2013)
- [46] 高橋和孝・西森秀稔、「相転移・臨界現象とくりこみ群」(丸善出版 2017)
- [47] M. P. Kennett, *ISRN Condensed Matter Physics*, 393616 (2013)
- [48] T. W. B. Kibble, *J. Phys. A: Math. Gen.* **9**, 1387 (1976)
- [49] T. W. B. Kibble, *Phys. Rep.* **67**, 183 (1980)
- [50] W. H. Zurek, *Nature* **317**, 505 (1985)
- [51] W. H. Zurek, *Acta Phys. Pol. B* **24**, 1301 (1993)
- [52] W. H. Zurek, *Phys. Rep.* **276**, 177 (1996)
- [53] A. del Campo and W. H. Zurek, *Int. J. Mod. Phys. A* **29**, 1430018 (2014)
- [54] J. Dziarmaga, *Adv. Phys.* **59**, 1063 (2010)
- [55] L. Sadler, J. Higbie, S. Leslie, M. Vengalattore, and D. Stamper-Kurn, *Nature* **443**, 312 (2006)
- [56] R. Schützhold and G. Schaller, *Phys. Rev. A* **74**, 060304 (2006)
- [57] P. Laguna and W. H. Zurek, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2519 (1997)
- [58] A. Yates and W. H. Zurek, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5477 (1998)
- [59] J. Dziarmaga, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5485 (1998)
- [60] N. D. Antunes, L. M. A. Bettencourt, and W. H. Zurek, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2824 (1999)
- [61] G. J. Stephens, L. M. A. Bettencourt, and W. H. Zurek, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 137004 (2002)
- [62] I. Chuang, R. Durrer, N. Turok, and B. Yurke, *Science* **251**, 1336 (1991)
- [63] V. Ruutu, V. Eltsov, A. Gill, T. Kibble, M. Krusius, Y. G. Makhlin, B. Placais, G. Volovik, and W. Xu, *Nature* **382**, 334 (1996)
- [64] C. Bauerle, Y. M. Bunkov, S. Fisher, H. Godfrin, and G. Pickett, *Nature* **382**, 332 (1996)
- [65] R. Monaco, J. Mygind, R. J. Rivers, and V. P. Koshelets, *Phys. Rev. B* **80**, 180501 (2009)

- [66] D. Golubchik, E. Polturak, and G. Koren, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 247002 (2010)
- [67] C. N. Weiler, T. W. Neely, D. R. Scherer, A. S. Bradley, M. J. Davis, and B. P. Anderson, *Nature* **455**, 948 (2008)
- [68] G. Lamporesi, S. Donadello, S. Serafini, F. Dalfovo, and G. Ferrari, *Nature Phys.* **9**, 656 (2013)
- [69] R. Schützhold, M. Uhlmann, Y. Xu, and U. R. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 200601 (2006)
- [70] F. M. Cucchietti, B. Damski, J. Dziarmaga, and W. H. Zurek, *Phys. Rev. A* **75**, 023603 (2007)
- [71] J. Dziarmaga, J. Meisner, and W. H. Zurek, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 115701 (2008)
- [72] C. De Grandi, V. Gritsev, and A. Polkovnikov, *Phys. Rev. B* **81**, 224301 (2010)
- [73] M. Snoek, *Europhysics Letters (EPL)* **95**, 30006 (2011)
- [74] J. Dziarmaga, M. Tylutki, and W. H. Zurek, *Phys. Rev. B* **86**, 144521 (2012)
- [75] J. Dziarmaga, and W. H. Zurek, *Scientific Reports*, **4**, 5950 (2014)
- [76] P. C. Hendry, N. S. Lawson, R. A. M. Lee, P. V. E. McClintock, and C. D. H. Williams, *Nature* **368**, 315 (1994)
- [77] S. Ducci, P. L. Ramazza, W. González-Viñas, and F. Arecchi, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 5210(1999)
- [78] R. Carmi and E. Polturak, *Phys. Rev. B* **60**, 7595 (1999)
- [79] J. Kirtley, C. Tsuei, and F. Tafuri, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 257001 (2003)
- [80] R. Carmi, E. Polturak, and G. Koren, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4966 (2000)
- [81] R. Monaco, J. Mygind, M. Aaroe, R. J. Rivers, and V. P. Koshelets, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 180604 (2006)
- [82] D. Chen, M. White, C. Borries, and B. DeMarco, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 235304 (2011)
- [83] K. Pyka, J. Keller, H. Partner, R. Nigmatullin, T. Burgermeister, D. Meier, K. Kuhlmann, A. Retzker, M. Plenio, W. H. Zurek, A. del Campo, and T. E. Mehlstäubler, *Nature Commun.* **4**, 2291 (2013)
- [84] S. Ulm, J. Roßnagel, G. Jacob, C. Degünther, S. T. Dawkins, U. G. Poschinger, R. Nigmatullin, A. Retzker, M. B. Plenio, F. Schmidt-Kaler, and K. Singer, *Nature Commun.* **4**, 2290 (2013)
- [85] T. W. B. Kibble, *Physics Today* **60**, 9, 47 (2007)
- [86] S. Braun, M. Friesdorf, S. S. Hodgman, M. Schreiber, J. P. Ronzheimer, A. Riera, M. del Rey, I. Bloch, J. Eisert, and U. Schneider, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **112**, 3641 (2015)

- [87] J. Zakrzewski, Phys. Rev. A **71**, 043601 (2005)
- [88] D. Jaksch, V. Venturi, J. I. Cirac, C. J. Williams, and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **89**, 40402 (2002)
- [89] M. Buchhold, U. Bissbort, S. Will, and W. Hofstetter, Phys. Rev. A **84**, 023631 (2011)
- [90] S. S. Natu, K. R. A. Hazzard, and E. J. Mueller, Phys. Rev. Lett. **106**, 125301 (2011)
- [91] H. Fehrmann, M. A. Baranov, B. Damski, M. Lewenstein, and L. Santos, Opt. Commun. **243**, 23 (2004)
- [92] N. Horiguchi, T. Oka, and H. Aoki, Journal of Physics: Conference Series **150**, 032007 (2009)
- [93] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, Numerical Recipes in Fortran 77 (Cambridge University Press, Cambridge, 1985)
- [94] E. Burovski, J. Machta, N. Prokof'ev, and B. Svistunov, Phys. Rev. B **74**, 132502 (2006)
- [95] P. M. Chesler, A. M. García-García, and H. Liu, Phys. Rev. X **5**, 021015 (2015)
- [96] A. Polkovnikov, K. Sengupta, A. Silva, and M. Vengalattore, Rev. Mod. Phys. **83**, 863 (2011)
- [97] A. J. Bray and A. D. Rutenberg, Phys. Rev. E **49**, R27 (1994)
- [98] S. Will, T. Best, U. Schneider, L. Hackermüller, D. S. Lühmann, and I. Bloch, Nature (London) **465**, 197 (2010)
- [99] K. Shimizu, Y. Kuno, T. Hirano, and I. Ichinose, Phys. Rev. A **97**, 033626 (2018)
- [100] A. Pelissetto and E. Vicari, Phys. Rev. Lett. **118**, 030602 (2017)
- [101] A. Pelissetto, D. Rossini, and E. Vicari, Phys. Rev. B **97**, 094414 (2018)
- [102] K. Shimizu, T. Hirano, J. Park, Y. Kuno, and I. Ichinose, Phys. Rev. A **98**, 063603 (2018)
- [103] G. Schmid, S. Todo, M. Troyer, and A. Dorneich, Phys. Rev. Lett. **88**, 167208 (2002)
- [104] X. Huo, Y-Y. Cui, D. Wang, and J-P. Lv, Phys. Rev. B **95**, 023613 (2017)
- [105] L-J. Zhai, H-Y. Wang, and S. Yin, Phys. Rev. B **97**, 134108 (2018)
- [106] M. Iskin, Phys. Rev. A **83**, 051606 (R) (2011)
- [107] T. Ohgoe, T. Suzuki, and N. Kawashima, Phys. Rev. B **86**, 054520 (2012)
- [108] K. Shimizu, T. Hirano, J. Park, Y. Kuno, and I. Ichinose, New J. Phys. **20**, 083006 (2018)
- [109] U. R. Fischer and B. Xiong, Phys. Rev. A **84**, 063635 (2011)
- [110] C. Kollath, A. M. Lauchli, and E. Altman, Phys. Rev. Lett. **98**, 180601 (2007)

- [111] F. Meinert, M. J. Mark, E. Kirilov, K. Lauber, P. Weinmann, M. Gröbner, and H.-C. Nägerl, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 193003 (2014)
- [112] Y. Kuno, K. Shimizu, and I. Ichinose, *Phys. Rev. A* **95**, 013607 (2017)
- [113] S. Baier, M. J. Mark, D. Petter, K. Aikawa, L. Chomaz, Z. Cai, M. Baranov, P. Zoller, and F. Ferlaino, *Science* **352**, 201 (2016)