

博士学位論文の要旨

題目 Current-density functional theory for bosonic superfluids
(ボゾン超流動体のための流れ密度汎関数理論)

藍沢 友也

超流動とは、極低温域で対象の系である流体が、粘性なしに流れる現象である。従来の超流動に対する理論に、巨視的な理論である二流体理論[1,2]や微視的な理論である Gross-Pitaevskii(GP)理論[3,4]と Bogoliubov 理論[5,6]がある。前者の二流体理論では、対象の超流動体を、粘性を持たない超流体成分と粘性を持つ常流体成分の二成分から成る系と考え、各成分の流速が大きくなると量子渦を介して超流体成分と常流体成分が互いに相互摩擦することが実験的に知られている[7,8]。一方で、後者の微視的理論のうち、GP 理論では、超流動相転移に関する Bose-Einstein 凝縮(BEC)の秩序変数が満たす Gross-Pitaevskii 方程式[3,4]を解くことにより、求めた秩序変数を用いて二流体理論の超流体成分に関する粒子数密度と流れ密度を計算することができる。また、Bogoliubov 理論では、BEC 秩序変数のゆらぎを考慮し、超流動励起状態に関する準粒子描像を用いて準粒子の励起エネルギースペクトルにより、二流体理論の常流体成分に関する粒子数密度と流れ密度を計算することができる。このように、従来では超流動現象の巨視的、微視的な観点からそれぞれアプローチする理論が存在するが、未だこれらの理論においても解決すべき課題がいくつか存在する。例えば、GP 理論や Bogoliubov 理論では個々に超流体と常流体の密度と流れ密度を求めることができるが、一つの理論の枠内で同時にこれらの二成分を扱うことができないため、計算が大変である。また、一方で上述したような、各成分の流速が大きい場合に顕著になる二成分間の相互摩擦の効果がこれらの GP 理論や Bogoliubov 理論には取り込まれていない。

これらの課題を解決するため、本研究では、熱平衡状態にある電子系で用いられている有限温度密度汎関数理論[11]を、ボゾン系である超流動体に適用できる

ように拡張した「ボゾン超流動体のための流れ密度汎関数理論(Current-density functional theory for bosonic superfluids : sf-CDFT)」[12]を開発した。本理論では、再現される基本変数に、超流動体の粒子数密度、粒子の流れ密度に加えて、超流動相転移に関する BEC 秩序変数を選んだ。従来の密度汎関数理論(DFT)[9,10]や有限温度密度汎関数理論 [11]と同様に、本理論においても基本変数を与える各物理量演算子とカップルする外部ポテンシャル、熱平衡状態の系における基本変数、そして熱平衡状態の系における密度行列との間に一対一の対応関係があるとする Hohenberg-Kohn(HK)の定理 I と、密度行列に関する Gibbs の変分原理を、基本変数に関する変分原理に書き換えられるとする HK 定理 II を証明した。そして、これらの基本変数を実際に計算するために、現実の系と同じ基本変数を再現するような、粒子間の相互作用のない仮想系を導入し、現実系と仮想系に上記の HK 定理を用いて、基本変数を再現する有効ポテンシャルを導出した。また、仮想系の大正準ハミルトニアンを対角化させる条件から、本理論において重要となる 2 本の一粒子方程式、すなわち、BEC 秩序変数を求めて超流体成分を記述する Gross-Pitaevskii-Kohn-Sham(GPKS)方程式と、残りの常流体成分を記述する Kohn-Sham(KS)方程式を導出した。このようにして、対角化した仮想系の大正準ハミルトニアンを用いて、熱平衡状態における基本変数の表式を導出した。上記の GPKS 方程式を解くことで BEC 秩序変数が求まり、それを用いて超流体成分の粒子数密度と流れ密度を計算することができる。また、KS 方程式を解いて求めた解を用いて常流体成分の粒子数密度と流れ密度を計算することができる。一方で、上記で求めた基本変数のうち、全粒子数密度と流れ密度は、それぞれ GPKS 方程式の解である BEC 秩序変数を用いて表される超流体成分に関する項と、KS 方程式の解を用いて表される常流体成分に関する項の二成分の和で表される。すなわち、本理論では、GPKS 方程式と KS 方程式を解くことにより、一つの理論の枠内で、超流体成分と常流体成分の粒子数密度と流れ密度を同時に計算でき、すなわちこれら二成分を同時に記述し、再現することができる。ま

た、本理論における有効ポテンシャルには、超流体成分と常流体成分の相互摩擦の効果を表す項が含まれており、これらの有効ポテンシャルを含む一粒子ハミルトニアンを用いて表される GPKS 方程式や KS 方程式を解くことで、本理論では二成分間の相互摩擦の効果まで取り込みつつ、流体の粒子数密度や流れ密度を計算することができる。最後に、本理論においても、従来の DFT 同様に、量子多体効果を含む交換相関エネルギー汎関数が定義されるが、この汎関数が満たすべき条件式を、超流動体の満たす連続の式から導出した。この条件式は、実際の基本変数の計算の際に必要な交換相関エネルギー汎関数の近似形の開発の際に用いることができる。

[参考文献]

- [1] Tisza L 1938 Transport Phenomena in Helium II *Nature* **141** 913
- [2] Landau L D 1941 The theory of superfluidity of helium II *J. Phys. USSR* **5** 71
- [3] Gross E P 1961 Structure of a quantized vortex in boson systems *Nuovo Cimento* **20** 454
- [4] Pitaevskii L P 1961 Vortex lines in an imperfect Bose gas *Soviet Physics JETP* **13** 451
- [5] Bogoliubov N N 1947 On the theory of superfluidity *J. Phys. (USSR)* **11** 23
- [6] de Gennes P G 1989 *Superconductivity of Metals and Alloys* (Reading, MA: Addison Wesley)
- [7] D. R. Ladner, R. K. Childers, and J. T. Tough: *Phys. Rev.* **B13** (1976) 2918.
- [8] C. J. Gorter and J. H. Mellink: *Physica* **15** (1949) 285.
- [9] Hohenberg P and Kohn W 1964 Inhomogeneous Electron Gas *Phys. Rev.* **136** B864
- [10] Kohn W and Sham L J 1965 Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects *Phys. Rev.* **140** A1133
- [11] Mermin N D 1965 Thermal Properties of the Inhomogeneous Electron Gas *Phys. Rev. A* **5** 137
- [12] T. Aizawa, M. Higuchi and K. Higuchi 2023, *J. Phys. Commun.* **7** 075003