

論文審査の要旨

博士の専攻分野の名称	博 士 (理 学)	氏名	藍 沢 友 也
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 Ⅱ・2 項該当		
論 文 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)			
論文審査担当者			
主 査	准 教 授	樋 口 克 彦	
審査委員	准 教 授	田 中 新	
審査委員	教 授	鬼 丸 孝 博	
審査委員	准 教 授	石 川 健 一	
〔論文審査の要旨〕			
<p>超流動は流体の粘性がゼロになる現象で、その発見以来さまざまな研究が行われてきた。超流動を引き起こす最も基本的なメカニズムはボース・アインシュタイン凝縮 (BEC) である。超流動に対する微視的理論としては、BEC の秩序変数を扱う Gross-Pitaevskii 理論、凝縮体の励起を扱う Bogoliubov 理論がある。しかし、これらの理論では流体を構成する超流体成分と常流体成分を同時に扱うことはできない。また、両成分間は量子渦を介して相互作用 (相互摩擦) することが知られているが、これらの理論では相互摩擦を扱うこともできない。</p> <p>著者は、電子系で広く用いられている密度汎関数理論(DFT)をボゾン超流体に適用できるように拡張し、「ボゾン超流動体のための流れ密度汎関数理論(sf-CDFT)」を開発した。本理論の特徴は二つある。一つは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再現できることである。もう一つは二成分間にはたらく相互摩擦が取り込まれていることである。DFT を基礎にした新しい理論を用いて数値計算するためには、多体効果を表す交換相関エネルギー汎関数に対する近似形が必要不可欠である。従来の DFT では、交換相関エネルギー汎関数が満たす厳密な関係式を導いておき、それらを満たすように近似形を開発してきた。これに倣い著者は、sf-CDFT における交換相関エネルギー汎関数が満たす厳密な関係式を導いている。</p> <p>第一章では、本研究の概略を述べ、本研究の意義を説明している。第二章では、研究背景および超流体に関する実験事実と既存の理論研究を詳述している。また、本章では相互作用するボーズ粒子系における BEC に関する解説を行っている。続く第三章では、電子系で用いられている DFT を解説している。特に、DFT で重要となる基本変数の概念、また相互作用のない仮想系などの説明を行っている。</p>			

第四章では、sf-CDFT の定式化を与えている。本理論では、再現される基本変数として、流体を構成する粒子の数密度、流れ密度、および BEC 秩序変数が選ばれている。従来の DFT と同様に、これらの基本変数に関する Hohenberg-Kohn の定理が証明され、それを用いて BEC 秩序変数が従う Gross-Pitaevskii-Kohn-Sham 方程式、および常流体の粒子数密度と流れ密度を再現する Kohn-Sham 軌道が従う Kohn-Sham 方程式が導出されている。これらの方程式には、基本変数の汎関数の形で与えられる二流体間の相互摩擦を表すポテンシャル項が含まれる。これらの方程式を連立して自己無撞着に解くことで、超流体成分、および常流体成分の粒子数密度と流れ密度をそれぞれ計算可能であることが示されている。

第五章では、超流動体に関する連続の式から、本理論における交換相関エネルギー汎関数が満たすべき条件式を導出している。また、本章では sf-CDFT と従来理論との比較を行い、sf-CDFT の優位性を述べている。特に、相互摩擦が本理論でどのように組み込まれているかを詳細に述べている。最後の第六章では、本研究の結論を述べている。

著者は、ボゾン超流体に適用できる第一原理理論である sf-CDFT を新しく開発した。本理論では、超流体成分と常流体成分を同時に記述することができる。さらに、物理学における未解決問題の一つである乱流を記述する上で重要と考えられる相互摩擦を取り込むことに成功している。本理論は未解決問題解明への端緒を開くものと期待でき、物性物理学の分野における重要な貢献であると高く評価される。

以上のことから、審査の結果、本論文の著者は、博士（理学）の学位を受ける資格が十分あるものと認める。