3. 第二量子化(場の量子化)

3.1 多体波動関数

多体 Schrödinger方程式

$$\left[\sum_i\left\{-\frac{\nabla_i^2}{2}+v(\mathbf{r}_i)\right\}+\frac{1}{2}\sum_{i\neq i'}\frac{1}{|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_{i'}|}\right]\Psi(\mathbf{r}_1,\cdots\mathbf{r}_N)=E\Psi(\mathbf{r}_1,\cdots\mathbf{r}_N)$$

$$\Psi(\mathbf{r}_1,\cdots\mathbf{r}_N)=\sum_{j_1=1}^{\infty}\cdots\sum_{j_N=1}^{\infty}C(j_1,j_2,\cdots j_N)\varphi_{j_1}(\mathbf{r}_1)\varphi_{j_2}(\mathbf{r}_2)\cdots\varphi_{j_N}(\mathbf{r}_N)$$

一体基底(basis)の数を $\infty\rightarrow j_{max}$ で打ち切ったとすると

多体basis数は j_{max}^N

粒子区別つかない ⟶ 入れ換え対称性

$\Psi(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1,\cdots\mathbf{r}_N)=\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\cdots\mathbf{r}_N)$; ボゾンの場合

$$\Downarrow$$

$C(j_2,j_1,\cdots j_N)=C(j_1,j_2,\cdots j_N)$ 拘束条件

独立な要素数は減る

独立な多体基底の数え方 (Bosonの場合)

ある一体basis $j(1\sim j_{max})$ を取る粒子数を n_j として、$(n_1,n_2,\cdots n_{j_{max}})$(基底)のとり得るパターンの数 ${}_{N+j_{max}-1}C_N$

粒子 N 個

|○ ○||○ ○| ○|||・・・○|○

仕切り: $j_{max}-1$ 個

仕切りを入れられる箇所: $N-1$ 個

$N-1$ 個から重複有りで $j_{max}-1$ 個選ぶパターンの数

例) 粒子数 $N=10$、一体 basis $j_{max}=8$ 個とすると

元々の多体 basis 数：$8^{10}=1,073,741,824$

独立な多体 basis 数：${}_{17}C_{10}=$ 19,448

$\boxed{\Psi(r_1,\cdots r_N)\text{をそのまま使うより、効率的な basis は無いのか？}}$

3.2 数状態

一次元連成調和振動子（フォノン鎖）の固有状態を借りて来る

$$|\{n_q\}\rangle=\frac{1}{\sqrt{n_1!}}\hat{b}_1^{+n_1}\frac{1}{\sqrt{n_2!}}\hat{b}_2^{+n_2}\cdots\frac{1}{\sqrt{n_q!}}\hat{b}_q^{+n_q}\cdots|0\rangle=\left(\prod_q\frac{\hat{b}_q^{+n_q}}{\sqrt{n_q!}}\right)|0\rangle$$

波数 q の粒子がそれぞれ n_q 個ある多体状態

$$\Downarrow$$

$$|\{n_j\}\rangle=\left(\prod_j\frac{\hat{b}_j^{+n_j}}{\sqrt{n_j!}}\right)|0\rangle \qquad [\hat{b}_j,\hat{b}_{j'}^{+}]=\delta_{jj'}$$

$\hat{b}_j^{+}$：一体状態 j の粒子を一個生成する演算子

b_j：その逆（消滅）

$$|\Psi\rangle=\sum_{\{n_j\}}C(\{n_j\})|\{n_j\}\rangle$$ 数状態の重ね合わせ

$\boxed{\text{全粒子数 N が異なるものも同時に重ね合わせできる。}}$

数の演算子

$\hat{n}_j=\hat{b}_j^{+}\hat{b}_j$　一体状態 j にある粒子の数の演算子

実際に $|\{n_j\}\rangle$ に演算して、(多体)固有状態である事を確かめる

（演習問題 7-1）

場の演算子

演算子のユニタリー変換の一例

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{\infty} \hat{b}_j \varphi_j(\mathbf{r}) \quad、\quad \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{\infty} \hat{b}_j^\dagger \varphi_j^*(\mathbf{r})$$

位置 $\mathbf{r}$ の粒子を1個消滅・生成させる演算子

波動関数では無く演算子

逆に、$\hat{b}_j = \int d^3r\, \varphi_j^*(r) \hat{\psi}(\mathbf{r})$

- 交換関係

$$[\hat{\psi}(r), \hat{\psi}(r')] = 0$$

$$[\hat{\psi}(r), \hat{\psi}^\dagger(r')] = \sum_{j,j'} \underbrace{[b_j, b_{j'}^\dagger]}_{\delta_{jj'}} \varphi_j(r) \varphi_{j'}^*(r')$$

$$= \sum_{j}^{\infty} \varphi_j(r) \varphi_j^*(r') = \delta(r-r')$$

- 数の演算子 ⟶ 密度演算子

$\hat{n}(r) \equiv \psi^\dagger(r)\psi(\mathbf{r})$：位置 $\mathbf{r}$ にある粒子数の演算子

3.3 ハミルトニアン

- 1体項：$\hat{\mathcal{H}}^{(1)}$

一体 basis を $\left\{-\frac{\nabla^2}{2} + v(\mathbf{r})\right\}$ の固有状態とする

$$\left\{-\frac{\nabla^2}{2} + v(r)\right\} \varphi_j^{(eig)}(\mathbf{r}) = \varepsilon_j \varphi_j^{(eig)}(\mathbf{r})$$

$b_j^{(eig)\dagger}$、$b_j^{(eig)}$ ：状態 φ_j^{eig} の生成・消滅演算子

粒子が1個だけの状態 $b_j^{(eig)\dagger}|0\rangle$ は $\mathcal{H}^{(1)}$ の固有状態

$$\hat{\mathcal{H}}^{(1)} b_j^{(eig)\dagger}|0\rangle = \underbrace{\varepsilon_j}_{\text{固有値}} b_j^{(eig)\dagger}|0\rangle$$ でなければならない

$$\mathcal{H}^{(1)} = \sum_j \varepsilon_j \hat{n}_j = \sum_j \varepsilon_j \hat{b}_j^{(eig)\dagger} \hat{b}_j^{(eig)}$$

同じ形

一次元フォノン鎖

$$\mathcal{H} = \sum_{q=1}^{N} \omega_q \left(b_q^\dagger b_q + \frac{1}{2} \right) = \sum_q \omega_q \hat{b}_q^\dagger \hat{b}_q + E_0$$

$$E_0 = \sum_q \frac{\omega_q}{2}$$

$$\varepsilon_j = \int d^3r\, \varphi_j^{(eig)*}(\mathbf{r}) \left\{ -\frac{\nabla^2}{2} + v(\mathbf{r}) \right\} \varphi_j^{(eig)}(\mathbf{r})$$

$$\mathcal{H}^{(1)} = \sum_j \int d^3r\, \hat{b}_j^{(eig)\dagger} \varphi_j^{(eig)*}(\mathbf{r}) \left\{ -\frac{\nabla^2}{2} + v(\mathbf{r}) \right\} \varphi_j^{(eig)}(\mathbf{r})\, \hat{b}_j^{(eig)}$$

$$\Downarrow \quad \int d^3r\, \varphi_j^{(eig)}(\mathbf{r})^* \varphi_{j'}^{(eig)}(\mathbf{r}) = \delta_{jj'}$$

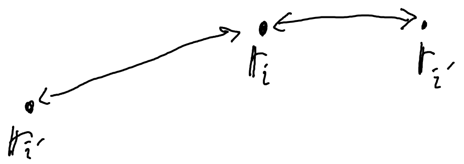
$$= \sum_{j}\sum_{j'} \int d^3r\, \underbrace{\hat{b}_j^{(eig)\dagger} \varphi_j^{(eig)*}(\mathbf{r})} \left\{ -\frac{\nabla^2}{2} + v(\mathbf{r}) \right\} \underbrace{\varphi_{j'}^{(eig)}(\mathbf{r})\, \hat{b}_{j'}^{(eig)}}$$

$$= \int d^3r\, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left\{ -\frac{\nabla^2}{2} + v(\mathbf{r}) \right\} \hat{\psi}(\mathbf{r})$$

一体basisに依存しない形式

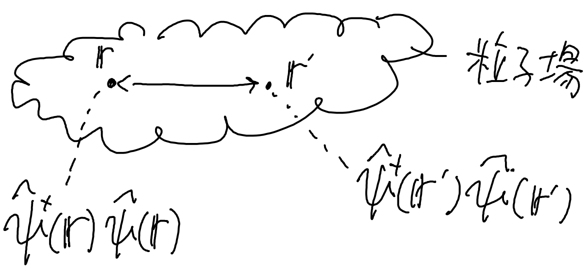
2体項(相互作用項) $\mathcal{H}^{(2)}$

元々 $\displaystyle \frac{1}{2} \sum_{i \neq i'} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|}$ ← 位置 $\mathbf{r}_i$, $\mathbf{r}_{i'}$ にある粒子間のCoulomb相互作用



…をすべての対について和をとる

・第二量子化



位置 $\mathbf{r}$ にある粒子数の演算子

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})$$

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2)} = \frac{1}{2}\int d^3r \int d^3r' \frac{\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$ とすれば良い？

…かと言うとそうでも無い

理由：粒子が1個だけ一粒子状態 j にある場合：$b_j^\dagger|0\rangle$

$\longrightarrow$ 相互作用は無い

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2)} = \frac{1}{2}\sum_{j_1 j_2 j_3 j_4} b_{j_1}^\dagger b_{j_2} b_{j_3}^\dagger b_{j_4} U_{j_1 j_2 j_3 j_4}$$

$$U_{j_1 j_2 j_3 j_4} \equiv \int d^3r \int d^3r' \frac{\varphi_{j_1}^*(\mathbf{r})\varphi_{j_2}(\mathbf{r})\varphi_{j_3}^*(\mathbf{r}')\varphi_{j_4}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

$$\langle 0|b_j \hat{\mathcal{H}}^{(2)} b_j^\dagger|0\rangle = \frac{1}{2}\sum_{j_1 j_2 j_3 j_4} U_{j_1 j_2 j_3 j_4} \langle 0|b_j b_{j_1}^\dagger b_{j_2} b_{j_3}^\dagger b_{j_4} b_j^\dagger|0\rangle$$

$$\langle 0|(\delta_{j_1 j} + b_{j_1}^\dagger b_j)(\delta_{j_2 j_3} + b_{j_3}^\dagger b_{j_2})(\delta_{j_4 j} + b_j^\dagger b_{j_4})|0\rangle$$

$$= \delta_{j_1 j}\delta_{j_4 j}\delta_{j_2 j_3}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{j_2} U_{j j_2 j_2 j} \longrightarrow \int d^3r \int d^3r' \frac{\varphi_j^*(\mathbf{r})\varphi_j(\mathbf{r}')\sum_{j_2}\varphi_{j_2}(\mathbf{r})\varphi_{j_2}^*(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

$\sum_{j_2}\varphi_{j_2}(\mathbf{r})\varphi_{j_2}^*(\mathbf{r}') \to \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$

$$= \frac{1}{2}\int d^3r \frac{|\varphi_j(\mathbf{r})|^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}|} \longrightarrow \infty$$ 本来は無いはずの効果

- 演算子の順番を修正

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2)} = \frac{1}{2}\int d^3r \int d^3r' \frac{\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r})}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

- 始めに2個消滅
- エルミート

まとめると

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}^{(1)} + \hat{\mathcal{H}}^{(2)}$$

$$= \int d^3r\, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\left\{-\frac{\nabla^2}{2} + v(\mathbf{r})\right\}\hat{\psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}\int d^3r \int d^3r' \frac{\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r})}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

ハミルトニアンには粒子数の情報が含まれない。

3.4 フェルミーディラック粒子（Fermion）

$\psi(r_1, r_2, r_3, \cdots, r_N) = -\psi(r_2, r_1, r_3, \cdots r_N)$

粒子の入れ換えに対して反対称

$$\Psi(r_1, \cdots r_N) = \sum_{j_1=1}^{\infty} \cdots \sum_{j_N=1}^{\infty} C(j_1, j_2, \cdots j_N)\varphi_{j_1}(r_1)\varphi_{j_2}(r_2)\cdots\varphi_{j_N}(r_N)$$

とすると $C(j_1, j_2, j_3, \cdots j_N) = -C(j_2, j_1, j_3, \cdots, j_N)$

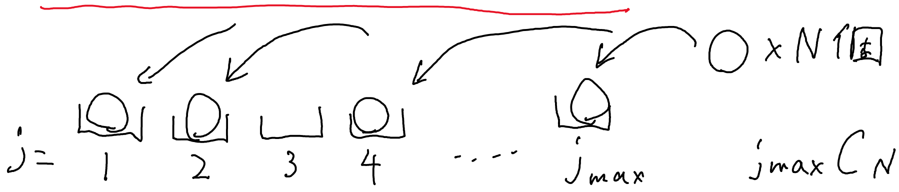
さらに $C(j_1, j_1, j_3, \cdots, j_N) = -C(j_1, j_1, j_3, \cdots, j_N) = 0$

→同じ一体状態を2個以上の粒子が取れない：パウリの排他律

・独立な多体状態の数え方（Fermion）

ある一体状態 $j(1 \sim j_{max})$ を取る粒子数を n_j として、$(n_1, n_2, \cdots n_{j_{max}})$ のとり得るパターンの数。

ただし、n_j は 0 または 1



$_{j_{max}}C_N$ 通り

例/ 粒子数 $N=5$、一体状態 $j_{max}=10$ 個とすると

元々の多体状態数：$5^{10} =$ 9,765,625

Boson多体状態数：$_{14}C_5 =$ 2,002

Fermion多体状態数：$_{10}C_5 =$ 252

・生成・消滅演算子

一体状態 j に対して、$\hat{c}_j^\dagger$、$\hat{c}_j$ → どの様な性質か？

①同じ状態に2個の粒子を生成できないようにする。

$$(c_j^\dagger)^2|\Psi\rangle = 0 \quad \Longrightarrow \quad c_j^\dagger c_j^\dagger = 0 \ 、\ c_j c_j = 0$$

任意の多体状態

② 数演算子はbosonの時と同じ様に働く。

$$\hat{n}_j \hat{c}_j^\dagger|0\rangle = \hat{c}_j^\dagger c_j \hat{c}_j^\dagger|0\rangle = c_j^\dagger|0\rangle$$

$n_j = 1$

$$\hat{n}_j c_{j'}^\dagger|0\rangle = c_j^\dagger c_j c_{j'}^\dagger|0\rangle = 0$$

$j \neq j'$　　$n_j = 0$

これらの関係を満たす為にはこうすると良い

$$\{c_j、c_{j'}^\dagger\} = c_j c_{j'}^\dagger + c_{j'}^\dagger c_j = \delta_{jj'}$$ 反交換関係

$$\{c_j、c_{j'}\} = c_j c_{j'} + c_{j'} c_j = 0$$ 特に$j=j'$のとき $c_j c_j = 0$

$$\{c_j^\dagger、c_{j'}^\dagger\} = 0 \qquad c_j^\dagger c_{j'}^\dagger = -c_{j'}^\dagger c_j^\dagger$$

j'に粒子を置いてからjに粒子を置く
jに粒子を置いてからj'に粒子を置く
逆符号
