Many–Body Problem

倉澤 治樹

1997 年 4 月， 2001 年 4 月， 2004 年 4 月， 2019 年 4 月

目 次

参考書

- A. L. Fetter and J.D. Walecka, Quantum theory of many–body systems (McGraw–Hill, 1971)
- P. Ring and P. Schuck, The nuclear many–body problem (Springer–Verlag, 1980)
- J. W. Negele and H. Orland, Quantum many–particle systems (Addison–Wesley, 1988)

1　第二量子化

粒子 i が状態 $|\alpha_i\rangle$ にある N 粒子系の状態を

$$|\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}\cdots\alpha_N^{(N)}\rangle \equiv |\alpha_1\rangle^{(1)}|\alpha_2\rangle^{(2)}\cdots|\alpha_N\rangle^{(N)}$$

で表わす。上付きの添字 ${}^{(i)}$ は粒子 i の状態であることを示す。1 粒子状態 $|\alpha_i\rangle$ の添字 i は 1 粒子状態を区別するための添字で, 粒子の番号とは無関係である。$|\alpha_i\rangle$ は規格直交系とする:

$$\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \delta_{ij}$$

1.1　スレーター行列式

N 個の同種粒子系では, 個々の粒子は量子力学的には区別できない。簡単のため $N = 2$ の場合を考えると, 粒子が状態 $|\alpha_1\rangle$ と $|\alpha_2\rangle$ にある 2 粒子系の状態は, 粒子 1 が $|\alpha_1\rangle$, 粒子 2 が $|\alpha_2\rangle$ にある状態 $|\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}\rangle$, あるいは粒子 1 が $|\alpha_2\rangle$, 粒子 2 が $|\alpha_1\rangle$ にある状態 $|\alpha_2^{(1)}\alpha_1^{(2)}\rangle$ とも表せる。一般にはこの 2 つの線形結合

$$|\alpha_1\alpha_2\rangle = C_1|\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}\rangle + C_2|\alpha_2^{(1)}\alpha_1^{(2)}\rangle \tag{1.1}$$

になる。同種粒子の非個別性を正しく取り入れるためには, 多粒子系の状態としては次の要請を満たす状態だけが許される:

- フェルミ粒子 (スピンが半整数の粒子) の場合, 任意の 2 つの粒子の状態を交換すると符号が変わる反対称の状態
- ボーズ粒子 (スピンが整数の粒子) の場合, 任意の 2 つの粒子の状態を交換しても不変な対称の状態

以下では, フェルミ粒子の多体系だけを考える。(1.1) で粒子 1 と粒子 2 の状態を交換して符号が変わるものは

$$|\alpha_1\alpha_2\rangle = C_1\left(|\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}\rangle - |\alpha_2^{(1)}\alpha_1^{(2)}\rangle\right)$$

である。C_1 は $|\alpha_1\alpha_2\rangle$ の規格化で決まる。$|\alpha_i\rangle$ の規格直交性から

$$\begin{aligned}\langle\alpha_1\alpha_2|\alpha_1\alpha_2\rangle &= |C_1|^2\left(\langle\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}| - \langle\alpha_2^{(1)}\alpha_1^{(2)}|\right)\left(|\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}\rangle - |\alpha_2^{(1)}\alpha_1^{(2)}\rangle\right)\\ &= 2|C_1|^2\Big(\langle\alpha_1|\alpha_1\rangle\langle\alpha_2|\alpha_2\rangle - \langle\alpha_1|\alpha_2\rangle\langle\alpha_2|\alpha_1\rangle\Big) = 2|C_1|^2 = 1\end{aligned}$$

$C_1 = 1/\sqrt{2}$ ととればよい。規格化された 2 フェルミ粒子系の状態は行列式を用いて

$$|\alpha_1\alpha_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} |\alpha_1\rangle^{(1)} & |\alpha_1\rangle^{(2)} \\ |\alpha_2\rangle^{(1)} & |\alpha_2\rangle^{(2)} \end{vmatrix}$$

と表せる。一般に N 個のフェルミ粒子系の状態は

$$|\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\det\left(|\alpha_i\rangle^{(j)}\right) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} |\alpha_1\rangle^{(1)} & |\alpha_1\rangle^{(2)} & \cdots & |\alpha_1\rangle^{(N)} \\ |\alpha_2\rangle^{(1)} & |\alpha_2\rangle^{(2)} & \cdots & |\alpha_2\rangle^{(N)} \\ \vdots & & & \\ |\alpha_N\rangle^{(1)} & |\alpha_N\rangle^{(2)} & \cdots & |\alpha_N\rangle^{(N)} \end{vmatrix}$$

である。これをスレーター行列式という。

- 粒子 i と j の状態を交換するということは, 添字 (i) と (j) を交換する, つまり, スレーター行列式の i 列と j 列を入れ換えることであり, 行列式の性質から符号が変わる。
- $\alpha_1,\ \alpha_2,\ \cdots,\ \alpha_N$ の中に 1 組でも同じものがある場合, この組の行を入れ換えれば符号だけが変わりスレーター行列式は 0 になるから, $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_N$ はすべて異なる状態でなければならない。つまり, 2 個以上の粒子が同じ 1 粒子状態を占めることは許されない (**パウリの原理**)。

1.2 生成・消滅演算子

状態 $|\alpha\rangle$ のフェルミ粒子を生成する演算子 $a^\dagger_\alpha$ が反交換関係

$$\{\, a_\alpha\,,\, a^\dagger_{\alpha'}\,\} \equiv a_\alpha a^\dagger_{\alpha'} + a^\dagger_{\alpha'} a_\alpha = \delta_{\alpha\alpha'} \tag{1.2}$$

$$\{\, a_\alpha\,,\, a_{\alpha'}\,\} \equiv a_\alpha a_{\alpha'} + a_{\alpha'} a_\alpha = 0 \tag{1.3}$$

$$\{\, a^\dagger_\alpha\,,\, a^\dagger_{\alpha'}\,\} \equiv a^\dagger_\alpha a^\dagger_{\alpha'} + a^\dagger_{\alpha'} a^\dagger_\alpha = 0 \tag{1.4}$$

を満たすとする。$N_\alpha \equiv a^\dagger_\alpha a_\alpha$ の固有値が n_α である固有状態を $|n_\alpha\rangle$ とする:

$$N_\alpha\,|n_\alpha\rangle = n_\alpha |n_\alpha\rangle$$

である。反交換関係を使うと

$$N_\alpha a^\dagger_\beta |n_\alpha\rangle = \left(a^\dagger_\beta N_\alpha + \delta_{\alpha\beta} a^\dagger_\beta \right) |n_\alpha\rangle = (n_\alpha + \delta_{\alpha\beta})\, a^\dagger_\beta |n_\alpha\rangle \tag{1.5}$$

$$N_\alpha a_\beta |n_\alpha\rangle = (n_\alpha - \delta_{\alpha\beta})\, a_\beta |n_\alpha\rangle \tag{1.6}$$

である。$a^\dagger_\alpha$ は N_α の固有値を 1 つだけ増やし, a_α は 1 つ減らす。したがって, 反交換関係を満たす $a^\dagger_\alpha$, a_α はそれぞれ生成演算子, 消滅演算子であり, N_α はその固有値が 1 粒子状態 $|\alpha\rangle$ にある粒子数を表す演算子と解釈できる。

$$N^2_\alpha = a^\dagger_\alpha a_\alpha a^\dagger_\alpha a_\alpha = a^\dagger_\alpha \left(1 - a^\dagger_\alpha a_\alpha \right) a_\alpha = a^\dagger_\alpha a_\alpha = N_\alpha$$

であるから, 固有値は $n^2_\alpha = n_\alpha$ より $n_\alpha = 0$ 及び $n_\alpha = 1$ だけである。これから反交換関係を設定するとパウリ原理を満たす。(1.6) で $n_\alpha = 0$ とすると

$$N_\alpha a_\alpha |n_\alpha = 0\,\rangle = -\, a_\alpha |n_\alpha = 0\,\rangle$$

であるから N_α の固有値は -1 になりそうだが, $a^2_\alpha = 0$ であるから $N_\alpha a_\alpha = a^\dagger_\alpha a^2_\alpha = 0$, したがって

$$a_\alpha |n_\alpha = 0\,\rangle = 0$$

であり -1 の固有状態は存在しない。

全ての N_α の固有値が 0 である規格化された状態を $|\,0\,\rangle$ とする。$|\,0\,\rangle$ はどの 1 粒子状態にも粒子が存在しないから**真空** (vacuum) と呼ばれる。このとき, 任意の α に対して

$$a_\alpha |\,0\,\rangle = 0$$

である。粒子が N 個ある状態

$$|\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle_{\rm a} \equiv a^\dagger_{\alpha_1} \cdots a^\dagger_{\alpha_N} |\,0\,\rangle \tag{1.7}$$

を考える。この状態は粒子の交換に関してスレーター行列式と同じ性質を持つ。

- $a^\dagger_\alpha$ の反交換関係 (1.4) のため, 2 粒子の交換に関して符号を変える。例えば, $a^\dagger_{\alpha_1}$ と $a^\dagger_{\alpha_3}$ を交換すると
$$a^\dagger_{\alpha_1}\, a^\dagger_{\alpha_2}\, a^\dagger_{\alpha_3} = -\, a^\dagger_{\alpha_1}\, a^\dagger_{\alpha_3}\, a^\dagger_{\alpha_2} = +\, a^\dagger_{\alpha_3}\, a^\dagger_{\alpha_1}\, a^\dagger_{\alpha_2} = -\, a^\dagger_{\alpha_3}\, a^\dagger_{\alpha_2}\, a^\dagger_{\alpha_1}$$
である。
- $a^\dagger_\alpha a^\dagger_\alpha = 0$ であるから, 1 つの一粒子状態は 1 つの粒子のみが占めることができパウリの原理を満たす。

α_i ($i = 1, 2, \cdots, N$) が全て異なるとする。

$$\begin{aligned}{}_{\rm a}\langle \alpha_1 \cdots \alpha_N | \alpha_1 \cdots \alpha_N \rangle_{\rm a} &= \langle\, 0\, | a_{\alpha_N} \cdots a_{\alpha_2} a_{\alpha_1} a^\dagger_{\alpha_1} a^\dagger_{\alpha_2} \cdots a^\dagger_{\alpha_N} |\, 0\, \rangle \\ &= \langle\, 0\, | a_{\alpha_N} \cdots a_{\alpha_2} \left(1 - a^\dagger_{\alpha_1} a_{\alpha_1} \right) a^\dagger_{\alpha_2} \cdots a^\dagger_{\alpha_N} |\, 0\, \rangle\end{aligned}$$

a_{α_1} は $a^\dagger_{\alpha_2}, \cdots, a^\dagger_{\alpha_N}$ とは単に反交換するだけである。したがって 2 行目で a_{α_1} を含む項は

$$a_{\alpha_1} a^\dagger_{\alpha_2} \cdots a^\dagger_{\alpha_N} |\, 0\, \rangle = (-1)^{N-1} a^\dagger_{\alpha_2} \cdots a^\dagger_{\alpha_N} a_{\alpha_1} |\, 0\, \rangle = 0$$

である。これから

$$\begin{aligned}{}_{\rm a}\langle \alpha_1 \cdots \alpha_N | \alpha_1 \cdots \alpha_N \rangle_{\rm a} &= \langle\, 0\, | a_{\alpha_N} \cdots a_{\alpha_3} a_{\alpha_2} a^\dagger_{\alpha_2} a^\dagger_{\alpha_3} \cdots a^\dagger_{\alpha_N} |\, 0\, \rangle \\ &= \langle\, 0\, | a_{\alpha_N} \cdots a_{\alpha_3} a^\dagger_{\alpha_3} \cdots a^\dagger_{\alpha_N} |\, 0\, \rangle \\ &\ \vdots \\ &= \langle\, 0\, |\, 0\, \rangle = 1\end{aligned} \tag{1.8}$$

となり $|\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle_{\rm a}$ は規格化されている。

一体演算子 f を考える。i 番目の粒子の f を f_i と書くことにすると, N 粒子系全体では

$$F = \sum_{i=1}^{N} f_i \tag{1.9}$$

である。これは生成・消滅演算子を用いた

$$F_{\rm a} = \sum_{\alpha\,\beta} f_{\alpha\beta}\, a^\dagger_\alpha\, a_\beta\,, \qquad \text{ただし}\ \ f_{\alpha\beta} \equiv \langle \alpha |\, f\, | \beta \rangle \tag{1.10}$$

と同等である。(1.10) は 1 粒子状態 $|\varphi\rangle$

$$|\varphi\rangle = \sum_\alpha c_\alpha |\alpha\rangle$$

における f の期待値

$$\langle \varphi |\, f\, | \varphi \rangle = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha |\, f\, | \beta \rangle c^*_\alpha c_\beta$$

で, 係数 c^*, c をそれぞれ生成演算子, 消滅演算子で置き換えたものである。さて, (1.9) と (1.10) の同等性を 2 粒子系の場合で示そう。2 粒子系の 2 つの状態

$$|\alpha\beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|\alpha^{(1)}\beta^{(2)}\rangle - |\beta^{(1)}\alpha^{(2)}\rangle \Big)\,, \quad |\alpha'\beta'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|\alpha'^{(1)}\beta'^{(2)}\rangle - |\beta'^{(1)}\alpha'^{(2)}\rangle \Big)$$

に対して

$$\langle \alpha'\beta' |\, F\, | \alpha\beta \rangle = \frac{1}{2} \Big(\langle \alpha'^{(1)}\beta'^{(2)}| - \langle \beta'^{(1)}\alpha'^{(2)}| \Big) \Big(f_1 + f_2 \Big) \Big(|\alpha^{(1)}\beta^{(2)}\rangle - |\beta^{(1)}\alpha^{(2)}\rangle \Big)$$

を考える。f_1 は粒子 1 の状態だけ, f_2 は粒子 2 の状態だけに作用するから, 例えば

$$\langle \alpha'^{(1)}\beta'^{(2)}|f_1|\alpha^{(1)}\beta^{(2)}\rangle = \langle\alpha'|f|\alpha\rangle\langle\beta'|\beta\rangle$$

他の項も同様にすると

$$\begin{aligned}\langle\alpha'\beta'|\,F\,|\alpha\beta\rangle &= \langle\alpha'|\,f\,|\alpha\rangle\langle\beta'|\beta\rangle + \langle\beta'|\,f\,|\beta\rangle\langle\alpha'|\alpha\rangle - \langle\beta'|\,f\,|\alpha\rangle\langle\alpha'|\beta\rangle - \langle\alpha'|\,f\,|\beta\rangle\langle\beta'|\alpha\rangle \\ &= f_{\alpha'\alpha}\delta_{\beta\beta'} + f_{\beta'\beta}\delta_{\alpha\alpha'} - f_{\beta'\alpha}\delta_{\beta\alpha'} - f_{\alpha'\beta}\delta_{\alpha\beta'} \qquad (1.11)\end{aligned}$$

となる。次に, 生成・消滅演算子を用いて求める。2 粒子系の状態は

$$|\alpha\beta\rangle_{\rm a} = a^\dagger_\alpha\, a^\dagger_\beta\,|\,0\,\rangle\,, \quad |\alpha'\beta'\rangle_{\rm a} = a^\dagger_{\alpha'}\, a^\dagger_{\beta'}\,|\,0\,\rangle$$

であるから

$${}_{\rm a}\langle\alpha'\beta'|\,F_{\rm a}\,|\alpha\beta\rangle_{\rm a} = \sum_{\mu\nu} f_{\mu\nu}\langle\,0\,|a_{\beta'}a_{\alpha'}a^\dagger_\mu a_\nu a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta|\,0\,\rangle$$

反交換関係を使うと

$$a_\nu a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta = \left(\delta_{\nu\alpha} - a^\dagger_\alpha a_\nu\right) a^\dagger_\beta = \delta_{\nu\alpha}a^\dagger_\beta - \delta_{\nu\beta}a^\dagger_\alpha + a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta a_\nu$$

これから

$$a_\nu a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta|\,0\,\rangle = \Big(\delta_{\nu\alpha}a^\dagger_\beta - \delta_{\nu\beta}a^\dagger_\alpha\Big)\,|\,0\,\rangle$$

である。このエルミート共役から

$$\langle\,0\,|a_{\beta'}a_{\alpha'}a^\dagger_\mu = \langle\,0\,|\Big(\delta_{\mu\alpha'}a_{\beta'} - \delta_{\mu\beta'}a_{\alpha'}\Big)$$

したがって

$$\begin{aligned}&{}_{\rm a}\langle\alpha'\beta'|\,F_{\rm a}\,|\alpha\beta\rangle_{\rm a} \\ &= f_{\alpha'\alpha}\langle\,0\,|\,a_{\beta'}a^\dagger_\beta|\,0\,\rangle + f_{\beta'\beta}\langle\,0\,|\,a_{\alpha'}a^\dagger_\alpha|\,0\,\rangle - f_{\beta'\alpha}\langle\,0\,|\,a_{\alpha'}a^\dagger_\beta|\,0\,\rangle - f_{\alpha'\beta}\langle\,0\,|\,a_{\beta'}a^\dagger_\alpha|\,0\,\rangle \\ &= f_{\alpha'\alpha}\delta_{\beta\beta'} + f_{\beta'\beta}\delta_{\alpha\alpha'} - f_{\beta'\alpha}\delta_{\beta\alpha'} - f_{\alpha'\beta}\delta_{\alpha\beta'} \qquad (1.12)\end{aligned}$$

(1.11), (1.12) から $\langle\alpha'\beta'|\,F\,|\alpha\beta\rangle = {}_{\rm a}\langle\alpha'\beta'|\,F_{\rm a}\,|\alpha\beta\rangle_{\rm a}$ となる。以上の結果は N 粒子系の場合にも成り立つ。 フェルミ粒子の N 粒子系を扱うとき, 次の 2 つの形式がある。

1. スレーター行列式で状態を表し, 1 体演算子として $F = \sum_{i=1}^N f_i$ を使う。
2. 状態と演算子を生成・消滅演算子で表し

$$|\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle_{\rm a} = a^\dagger_{\alpha_1}\cdots a^\dagger_{\alpha_N}|\,0\,\rangle\,, \quad F_{\rm a} = \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta}\,a^\dagger_\alpha a_\beta$$

　この場合, 粒子 1, 2 などの区別はそもそもない。

2 粒子 i と j に依存する演算子 $v(i,j)$ の場合 (ただし, $v(i,j) = v(j,i)$)

$$V = \sum_{i<j} v(i,j) = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} v(i,j)$$

に対応する生成・消滅演算子による表現は

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \langle\alpha\beta|v|\alpha'\beta'\rangle\, a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta a_{\beta'} a_{\alpha'}\,, \quad \langle\alpha\beta|v|\alpha'\beta'\rangle \equiv \langle\alpha^{(1)}\beta^{(2)}|\, v(1,2)\,|\alpha'^{(1)}\beta'^{(2)}\rangle \tag{1.13}$$

である。消滅演算子の順序に注意すること。ここで

$$\langle\alpha\beta|\,\overline{v}\,|\alpha'\beta'\rangle \equiv \langle\alpha\beta|\,v\,|\alpha'\beta'\rangle - \langle\alpha\beta|\,v\,|\beta'\alpha'\rangle \tag{1.14}$$

とする。$\langle\alpha\beta|\,\overline{v}\,|\beta'\alpha'\rangle = -\langle\alpha\beta|\,\overline{v}\,|\alpha'\beta'\rangle$ であるから $\langle\alpha\beta|\,\overline{v}\,|\alpha'\beta'\rangle$ は α', β' について反対称である。さらに, $v(1,2)$ は 1 と 2 を入れ替えても変わらないから

$$\langle\beta\alpha|\,\overline{v}\,|\alpha'\beta'\rangle = \langle\alpha\beta|\,\overline{v}\,|\beta'\alpha'\rangle = -\langle\alpha\beta|\,\overline{v}\,|\alpha'\beta'\rangle$$

となり, α, β についても反対称である。この反対称化された行列要素を用いると

$$\mathcal{V} = \frac{1}{4}\sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \langle\alpha\beta|\,\overline{v}\,|\alpha'\beta'\rangle\, a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta a_{\beta'} a_{\alpha'}$$

になる。

1 粒子の任意の波動関数 $\varphi(\boldsymbol{r})$ は $|\alpha\rangle$ の波動関数 $u_\alpha(\boldsymbol{r})$ を用いて

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = \sum_\alpha c_\alpha u_\alpha(\boldsymbol{r}) \tag{1.15}$$

と展開できる。展開係数 c_α は $|\alpha\rangle$ の直交性から

$$c_\alpha = \int d^3r\, \varphi(\boldsymbol{r})\, u^*_\alpha(\boldsymbol{r}) \tag{1.16}$$

である。なお, (1.16) を (1.15) に代入すると

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = \sum_\alpha u_\alpha(\boldsymbol{r}) \int d^3r'\, \varphi(\boldsymbol{r}')\, u^*_\alpha(\boldsymbol{r}') = \int d^3r'\, \varphi(\boldsymbol{r}') \sum_\alpha u_\alpha(\boldsymbol{r}) u^*_\alpha(\boldsymbol{r}')$$

であるから

$$\sum_\alpha u_\alpha(\boldsymbol{r})\, u^*_\alpha(\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{1.17}$$

になる。

(1.15) で展開係数 c_α を消滅演算子 a_α で置き換えた演算子 $\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r}) = \sum_\alpha u_\alpha(\boldsymbol{r})\, a_\alpha \tag{1.18}$$

を考える。$\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$ は波動関数ではなく演算子であることを明確にするため ^ を付けた。$\hat{\psi}$ と $\hat{\psi}^\dagger$ の反交換関係は

$$\{\, \hat{\psi}(\boldsymbol{r})\,,\, \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')\,\} = \sum_{\alpha\alpha'} u_\alpha(\boldsymbol{r}) u^*_{\alpha'}(\boldsymbol{r}')\{\, a_\alpha\,,\, a^\dagger_{\alpha'}\,\} = \sum_\alpha u_\alpha(\boldsymbol{r}) u^*_\alpha(\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

$$\{\, \hat{\psi}(\boldsymbol{r})\,,\, \hat{\psi}(\boldsymbol{r}')\,\} = \{\, \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\,,\, \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')\,\} = 0$$

を満たす。(1.16) に対応して

$$a_\alpha = \int d^3r\, \hat{\psi}(\boldsymbol{r})\, u^*_\alpha(\boldsymbol{r})$$

である。

多体系のハミルトニアンを $\hat{\psi}$, $\hat{\psi}^\dagger$ で表す。運動エネルギーの部分は

$$T = \frac{1}{2m}\sum_{\alpha\beta}\langle\alpha|\boldsymbol{p}^2|\beta\rangle\, a_\alpha^\dagger\, a_\beta = \frac{1}{2m}\sum_{\alpha\beta}\langle\alpha|\boldsymbol{p}^2|\beta\rangle \int d^3r'\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')\, u_\alpha(\boldsymbol{r}') \int d^3r''\,\hat{\psi}(\boldsymbol{r}'')\, u_\beta^*(\boldsymbol{r}'')$$

である。ところで

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha\beta}\langle\alpha|\boldsymbol{p}^2|\beta\rangle\, u_\alpha(\boldsymbol{r}')u_\beta^*(\boldsymbol{r}'') &= -\hbar^2\sum_{\alpha\beta}\int d^3x\, u_\alpha^*(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\nabla}_x^2 u_\beta(\boldsymbol{x})\, u_\alpha(\boldsymbol{r}')u_\beta^*(\boldsymbol{r}'') \\ &= -\hbar^2\int d^3x\,\sum_\alpha u_\alpha^*(\boldsymbol{x})u_\alpha(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{\nabla}_x^2\sum_\beta u_\beta(\boldsymbol{x})u_\beta^*(\boldsymbol{r}'') \\ &= -\hbar^2\int d^3x\,\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}')\boldsymbol{\nabla}_x^2\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}'') \\ &= -\hbar^2\boldsymbol{\nabla}_{r'}^2\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'')\end{aligned}$$

これから

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r'\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{\nabla}_{r'}^2\int d^3r''\hat{\psi}(\boldsymbol{r}'')\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'') = -\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\nabla}^2\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$$

になる。これは 1 粒子状態 $\varphi(\boldsymbol{r})$ での期待値

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\,\varphi^*(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\nabla}^2\varphi(\boldsymbol{r})$$

において, 波動関数を演算子 $\varphi\to\hat{\psi}$, $\varphi^*\to\hat{\psi}^\dagger$ で置き換えたものである。2 体の相互作用部分も同様にして

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\nabla}^2\hat{\psi}(\boldsymbol{r}) + \frac{1}{2}\int d^3r\,d^3r'\;\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')v(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\hat{\psi}(\boldsymbol{r}')\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$$

になる。

演算子 $\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$ は普通の波動関数の展開係数 c_α を消滅演算子 a_α に置き換えたものであり, 量子力学の波動関数をいわば再度 “量子化” したということになる。このため, 生成・消滅演算子を用いた多体系の扱いを**第二量子化** (second quantization) という。これを**場の理論** (quantum field theory) と言ってもよい。1 粒子状態 $a_\alpha^\dagger|\,0\,\rangle$ に対応する波動関数は $u_\alpha(\boldsymbol{x})$ である。したがって

$$\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})|\,0\,\rangle = \sum_\alpha u_\alpha^*(\boldsymbol{r})\,a_\alpha^\dagger|\,0\,\rangle$$

に対応する波動関数 $\varphi(\boldsymbol{x})$ は

$$\varphi(\boldsymbol{x}) = \sum_\alpha u_\alpha^*(\boldsymbol{r})\,u_\alpha(\boldsymbol{x}) = \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r})$$

である。$\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})$ は点 $\boldsymbol{r}$ に粒子を生成する場である。

2　ハートリー・フォック近似

N 個のフェルミオン多体系のハミルトニアンが

$$H = \sum_{i=1}^{N} t(i) + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} v(i,j) \tag{2.1}$$

で与えられるとする。ここで, t は運動エネルギーを, v は粒子間の相互作用を表す。適当な 1 粒子状態の完全規格直交系を設定し, N 粒子系のスレーター行列式 $|\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N\rangle$ を考える。$\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_N$ として可能なすべての組み合わせを作れば, スレーター行列式の組は N 粒子系の完全系になる。この状態空間内で H の固有状態を展開して固有状態を求めればよいわけだが, それは実際上不可能である。そこで, 系の基底状態を単一のスレーター行列式で近似する。このとき, 最も最適な 1 粒子状態 $|\,\alpha\,\rangle$ を変分法で求める。

2.1　エネルギー期待値

基底状態を

$$|\ \rangle \equiv a_1^\dagger a_2^\dagger \cdots a_N^\dagger |\,0\,\rangle$$

とする。ただし, 簡単のため粒子が占めている 1 粒子状態を番号 1, 2, $\cdots$, N で表す。また

$$\begin{aligned}\overline{v}_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'} &= \langle\alpha\beta|\,\overline{v}\,|\alpha'\beta'\rangle = \langle\alpha^{(1)}\beta^{(2)}|\,v(1,2)\,|\alpha'^{(1)}\beta'^{(2)}\rangle - \langle\alpha^{(1)}\beta^{(2)}|\,v(1,2)\,|\beta'^{(1)}\alpha'^{(2)}\rangle\\ t_{\alpha\beta} &= \langle\alpha|\,t\,|\beta\rangle\end{aligned}$$

と略記する。生成・消滅演算子を用いるとハミルトニアンは

$$H = T + V\,, \quad T = \sum_{\alpha\alpha'} t_{\alpha\alpha'}\, a_\alpha^\dagger a_{\alpha'}\,, \quad V = \frac{1}{4}\sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \overline{v}_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'}\, a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'} \tag{2.2}$$

である。

$E_{\mathrm{HF}} = \langle\ |H|\ \rangle$ を求める。まず, 運動エネルギー

$$\langle\ |T|\ \rangle = \sum_{\alpha\alpha'} t_{\alpha\alpha'} \langle\ |\,a_\alpha^\dagger a_{\alpha'}|\ \rangle$$

について考える。1 粒子状態 $|\alpha'\rangle$ が $|\,\rangle$ において占められていない, つまり, $\alpha' \neq i$ ($i = 1, 2, \cdots, N$) ならば $a_{\alpha'}$ は $a_i^\dagger$ とは反交換するだけであるから

$$a_{\alpha'}|\ \rangle = a_{\alpha'} a_1^\dagger a_2^\dagger \cdots a_N^\dagger |\,0\,\rangle = (-1)^N a_1^\dagger a_2^\dagger \cdots a_N^\dagger\, a_{\alpha'}|\,0\,\rangle = 0$$

である。次に $\alpha' = i$ の場合, $a_\alpha^\dagger a_i|\ \rangle$ は状態 i に粒子がない状態 $a_i|\ \rangle$ に新たに状態 $|\alpha\rangle$ の粒子を生成する。$\alpha = i$ ならば元の状態 $|\ \rangle$ に戻るだけだが, $\alpha \neq i$ ならば, $a_\alpha^\dagger a_i|\ \rangle$ と $|\ \rangle$ は粒子が占める状態が異なるから $\langle\ |a_\alpha^\dagger a_i|\ \rangle = 0$ である。$a_i^\dagger|\ \rangle = 0$ であるから

$$\langle\ |\,a_i^\dagger a_i|\ \rangle = \langle\ |\,1 - a_i a_i^\dagger\,|\ \rangle = 1$$

以上をまとめると

$$\langle\ |\,a_\alpha^\dagger a_{\alpha'}|\ \rangle = \delta_{\alpha\alpha'}\theta_\alpha\,, \qquad \theta_\alpha = \begin{cases} 1\,, & \alpha = 1,\,2,\,\cdots,\,N\ \text{のとき} \\ 0\,, & \text{その他}\end{cases} \tag{2.3}$$

と表せる。これから

$$\langle\ |T|\ \rangle = \sum_{i=1}^{N} t_{\,i\,i} = |\ \rangle \text{ で占有している 1 粒子状態 } |\,i\,\rangle \text{ での期待値の和}$$

になる。

次に $\langle\ |V|\ \rangle$ を求める。T の議論と同様に $i,\, j = 1, 2, \cdots, N$ とするとき $\alpha' \neq i,\ \beta' \neq j$ ならば $a_{\beta'} a_{\alpha'} |\ \rangle = 0$ であるから

$$\langle\ |V|\ \rangle = \frac{1}{4} \sum_{i,\,j=1}^{N} \sum_{\alpha\beta} \overline{v}_{\alpha\beta\, ij} \langle\ |\, a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta a_j a_i |\ \rangle$$

$a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta a_j a_i |\ \rangle$ が (符号を除いて) 元の状態 $|\ \rangle$ に戻るためには, $\alpha = i,\ \beta = j$ あるいは $\alpha = j,\ \beta = i$ 以外にはない。したがって

$$\langle\ |V|\ \rangle = \frac{1}{4} \sum_{i,\,j=1}^{N} \Big(\overline{v}_{ij\, ij} \langle\ |\, a^\dagger_i a^\dagger_j a_j a_i |\ \rangle + \overline{v}_{ji\, ij} \langle\ |\, a^\dagger_j a^\dagger_i a_j a_i |\ \rangle \Big) = \frac{1}{2} \sum_{i,\,j=1}^{N} \overline{v}_{ij\, ij} \langle\ |\, a^\dagger_i a^\dagger_j a_j a_i |\ \rangle$$

ところで

$$\langle\ |\, a^\dagger_i a^\dagger_j a_j a_i |\ \rangle = \langle\ |\, a^\dagger_i \left(1 - a_j a^\dagger_j\right) a_i |\ \rangle = \langle\ |\, a^\dagger_i a_i |\ \rangle - \langle\ |\, a^\dagger_i a_j \left(\delta_{ij} - a_i a^\dagger_j\right) |\ \rangle$$

$\langle\ |\, a^\dagger_i a_j |\ \rangle = \delta_{ij}$ 及び $a^\dagger_j |\ \rangle = 0$ より

$$\langle\ |\, a^\dagger_i a^\dagger_j a_j a_i |\ \rangle = 1 - \delta_{ij}$$

になるから

$$\langle\ |V|\ \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,\,j=1}^{N} \overline{v}_{ij\, ij} - \frac{1}{2} \sum_{i} \overline{v}_{ii\, ii} = \frac{1}{2} \sum_{i,\,j=1}^{N} \overline{v}_{ij\, ij}$$

したがって H の期待値は

$$E_{\mathrm{HF}} = \langle\ |\, H\, |\ \rangle = \sum_{i=1}^{N} t_{\,i\,i} + \frac{1}{2} \sum_{i,\,j=1}^{N} \overline{v}_{ij\, ij} \tag{2.4}$$

で与えられる。

2.2 ハートリー・フォック方程式

正確な基底状態 $|\,\Psi_0\,\rangle$ のエネルギー固有値を E_0 とすると $E_{\mathrm{HF}} \geq E_0$ である。$|\,\Psi_0\,\rangle$ を単一のスレーター行列式で近似する場合, E_{HF} を最小にするスレーター行列式が最も最適な状態である。E_{HF} を求めるとき, 規格直交性 $\langle\, i\,|\,j\,\rangle = \delta_{ij}$ を仮定している。したがって, ϵ_{ij} をラグランジュの未定定数として

$$E'_{\mathrm{HF}} = E_{\mathrm{HF}} - \sum_{i,j=1}^{N} \epsilon_{ij} \langle\, i\,|\,j\,\rangle$$

を最小にする。これは

$$E'_{\mathrm{HF}} = E_{\mathrm{HF}} - \sum_{i=1}^{N} \epsilon_{i} \langle\, i\,|\,i\,\rangle$$

を最小にすればよいことが示せる。ある 1 つの占有している状態 $|\,k\,\rangle$ を微小変化 $|\,k\,\rangle + |\,\delta\phi\,\rangle$ させたときの E'_{HF} の変化を $\delta E'_{\mathrm{HF}}$ とすると, 求める条件は $\delta E'_{\mathrm{HF}} = 0$ である。ブラの変分とケット

の変分は独立と見なせるから, ブラの変分だけを扱う。ブラ $\langle\, k\,|$ のみを変分すると, (2.4) において $i=k$, $j=k$ 以外は変化しないから

$$\delta E_{\rm HF} = \langle\, \delta\phi\,|\, t\,|\, k\,\rangle + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\langle\, \delta\phi\; j\,|\,\overline{v}\,|\, k\, j\,\rangle + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\langle\, i\,\delta\phi\,|\,\overline{v}\,|\, i\, k\,\rangle = \langle \delta\phi|\, t\,|k\rangle + \sum_{i=1}^{N}\langle \delta\phi\; i\,|\,\overline{v}\,|k\, i\,\rangle$$

したがって, $\delta E'_{\rm HF} = \delta E_{\rm HF} + \epsilon_k\langle\, \delta\phi\,|\, k\,\rangle = 0$ は

$$\langle\, \delta\phi\,|\, t\,|\, k\,\rangle + \sum_{i=1}^{N}\langle\, \delta\phi\, i\,|\,\overline{v}\,|\, k\, i\,\rangle = \epsilon_k\langle\, \delta\phi\,|\, k\,\rangle$$

となる。ここで

$$\langle\, \alpha\,|\, u_{\rm HF}\,|\, \beta\,\rangle = \sum_{i=1}^{N}\langle\, \alpha\, i\,|\,\overline{v}\,|\, \beta\, i\,\rangle\,, \quad \text{つまり} \quad u_{\rm HF}(1) \equiv \sum_{i=1}^{N}\langle\, i^{(2)}\,|\,\overline{v}(1,2)\,|\, i^{(2)}\,\rangle \tag{2.5}$$

とおく。 2 番目の式では, 粒子 2 について $\overline{v}(1,2)$ の期待値をとったもので, 粒子 1 については演算子である。上の変分方程式は $h_{\rm HF} = t + u_{\rm HF}$ を用いると

$$\langle\, \delta\phi\,|\, h_{\rm HF}\,|\, k\,\rangle = \epsilon_k\langle\, \delta\phi\,|\, k\,\rangle\,, \quad \text{したがって} \quad h_{\rm HF}|\, k\,\rangle = \epsilon_k|\, k\,\rangle \tag{2.6}$$

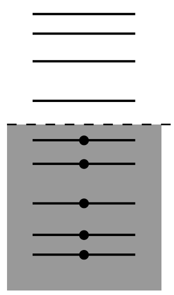
である。求めるべき 1 粒子状態は $h_{\rm HF}$ の固有状態であり, 未定乗数 ϵ_k は $h_{\rm HF}$ の固有値になる。固有値方程式 (2.6) を**ハートリー・フォック方程式** (Hartree–Fock equation) という。本来のハミルトニアン (2.1) の固有状態を $h_{\rm HF}$ の 1 粒子固有状態のスレーター行列式で近似する。これを**ハートリー・フォック近似** (Hartree–Fock approximation) という。この近似における基底状態は, $h_{\rm HF}$ の固有値のうち低い方の N 個の状態から作ったスレーター行列式である。

HF 近似では, 粒子は一体ポテンシャル $u_{\rm HF}$ 中をあたかも独立に運動している。このポテンシャル (2.5) は 1 粒子状態の基底系 $\{|k\rangle\}$ が分かっていなければ決まらない。一方, $\{|k\rangle\}$ を求めるには $u_{\rm HF}$ が求まっている必要がある。したがって, 実際に $h_{\rm HF}$ の 1 粒子状態を決定するには, 次のような反復法を行うことになる。まず, $u_{\rm HF}$ として適当なポテンシャルを仮定して $h_{\rm HF}$ の固有状態を求める。この固有状態うちエネルギーの低い N 個の状態を用いて $u_{\rm HF}$ を計算し, 再度 $h_{\rm HF}$ の固有状態を求める。固有状態を求めるとき使った $u_{\rm HF}$ と固有状態から求めた $u_{\rm HF}$ が一致するまでこの操作を繰り返す。これを**自己無撞着** (self–consistent) に $u_{\rm HF}$ を決定するという。

HF 近似の基底状態で占められている 1 粒子状態のエネルギーの中で最大のものを**フェルミエネルギー** (Fermi energy), HF 基底状態を**フェルミの海** (Fermi sea) とも呼ぶ。フェルミエネルギーを $\epsilon_{\rm F}$ とすると, $\epsilon_k < \epsilon_{\rm F}$ のとき a_k はフェルミの海の中の粒子を消滅させるので, 海の中に**空孔** (hole) を生成することになる。$\epsilon_{\rm F}$ をエネルギーの基準にすると, この空孔は正エネルギー

$$-\,(\epsilon_k - \epsilon_{\rm F}) > 0$$

の粒子と見なすことができる。$|\,\rangle$ で占有されていない 1 粒子状態を**粒子状態** (particle state), 占有されている 1 粒子状態を**空孔状態** (hole state) という。



生成演算子 $b_k^\dagger$ を

$$b_k^\dagger = \begin{cases} a_k^\dagger\,, & \epsilon_k > \epsilon_{\rm F} \text{ のとき} (\ \theta_k = 0\ ) \\ a_k\,, & \epsilon_k \le \epsilon_{\rm F} \text{ のとき} (\ \theta_k = 1\ ) \end{cases} \tag{2.7}$$

で定義すれば, $b_k^\dagger$ は粒子または空孔を生成し, 全ての k に対して $b_k|\,\rangle = 0$ になる。HF 基底状態は粒子も空孔もない状態, **粒子–空孔真空** (particle–hole vacuum) である。

以下では, 粒子状態を p, p', 空孔状態を h, h' などで表し, 区別しないときはギリシャ文字 α, β などを使う。

ハートリー・フォック方程式を微分方程式に書き直す。$|\alpha\rangle$ の波動関数を $\psi_\alpha(\boldsymbol{r})$ とする。ただし, スピン 1/2 であるから $\psi_\alpha(\boldsymbol{r})$ は 2 成分スピノールである。つまり, 2 つの関数を用いて

$$\psi_\alpha(\boldsymbol{r}) = \begin{pmatrix} f_\alpha(\boldsymbol{r}) \\ g_\alpha(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix}, \qquad \psi_\alpha^\dagger(\boldsymbol{r}) = \Big(f_\alpha^*(\boldsymbol{r}) \;\; g_\alpha^*(\boldsymbol{r}) \Big)$$

と表せる。

$$h_{\rm HF}|h\rangle = t|h\rangle + \sum_{h'} \langle h'^{(2)}|\, v(1,2)\, |h^{(1)} h'^{(2)}\rangle - \sum_{h'} \langle h'^{(2)}|\, v(1,2)\, |h'^{(1)} h^{(2)}\rangle$$

を波動関数で表すと

$$h_{\rm HF}\, \psi_h(\boldsymbol{r}) = t\, \psi_h(\boldsymbol{r}) + \sum_{h'} \int d^3r' \psi_{h'}^\dagger(\boldsymbol{r}')\, v(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \Big(\psi_h(\boldsymbol{r})\psi_{h'}(\boldsymbol{r}') - \psi_{h'}(\boldsymbol{r})\psi_h(\boldsymbol{r}') \Big)$$

ここで

$$u_{\rm H}(\boldsymbol{r}) = \sum_{h'} \int d^3r'\, \psi_{h'}^\dagger(\boldsymbol{r}')\, v(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\, \psi_{h'}(\boldsymbol{r}')\,, \qquad u_{\rm F}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = -\sum_{h'} \psi_{h'}^\dagger(\boldsymbol{r}')\, v(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\, \psi_{h'}(\boldsymbol{r})$$

とするとハートリー・フォック方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + u_{\rm H}(\boldsymbol{r}) \right) \psi_h(\boldsymbol{r}) + \int d^3r'\, u_{\rm F}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi_h(\boldsymbol{r}') = \epsilon_h\, \psi_h(\boldsymbol{r})$$

になる。$u_{\rm H}(\boldsymbol{r})$ は空間の 1 点 $\boldsymbol{r}$ だけに依存する局所的 (local) なポテンシャルであり, 求めようとする状態に共通である。これを**ハートリーポテンシャル**という。一方, 左辺の第 3 項をフォック項 (Fock term) あるいは交換項 (exchange term) という。$u_{\rm F}$ は 2 点 $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{r}'$ に依存する非局所的なポテンシャルである。

- N 体系の状態を反対称化しない単なる 1 粒子状態の積で表した場合には, ハートリーポテンシャルだけになる。フォック項は反対称化の効果である。
- 簡単のため v がスピンに依存しないとすると, $\psi^\dagger$ と v は入れ替えてよいから

  $$u_{\rm H}(\boldsymbol{r}) = \int d^3r'\, v(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\, \rho(\boldsymbol{r}')\,, \qquad \rho(\boldsymbol{r}) = \sum_h \psi_h^\dagger(\boldsymbol{r})\psi_h(\boldsymbol{r})$$

  と書ける。ただし $\rho(\boldsymbol{r})$ は $\boldsymbol{r}$ に粒子を見出す確率であり古典的な密度分布に対応する。したがって, $u_{\rm H}$ はある粒子と他の粒子との相互作用 v を他の粒子について平均化したものである。
- (2.5) より

  $$\epsilon_\alpha = \langle\, \alpha\, |\, h_{\rm HF}\, |\, \alpha\, \rangle = t_{\alpha\alpha} + \sum_h \overline{v}_{\alpha h\, \alpha h}$$

  であるから

  $$E_{\rm HF} = \langle\,|\, H\,|\,\rangle = \sum_h t_{hh} + \frac{1}{2}\sum_{hh'} \overline{v}_{hh'\, hh'} = \sum_h \epsilon_h - \frac{1}{2}\sum_{hh'} \overline{v}_{hh'\, hh'} \tag{2.8}$$

  となる。$E_{\rm HF}$ は基底状態で占めている 1 粒子状態のエネルギー ϵ_h の単なる和ではない。

2.3　フェルミガス模型

自由なフェルミ粒子の多体系を考える。1 粒子状態 $\psi_\alpha(\boldsymbol{r})$ は平面波

$$\psi_\alpha(\boldsymbol{r}) = C\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\,\chi_\sigma\,, \qquad \alpha = \{\boldsymbol{k}\,,\,\sigma\} \tag{2.9}$$

である。ここで χ_σ ($\sigma = \pm 1/2$) は 2 成分スピノール

$$\chi_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \chi_\sigma^\dagger \chi_{\sigma'} = \delta_{\sigma\sigma'}$$

である。(2.9) の波動関数は無限に広がっており, 通常の規格化

$$\int d^3r\, \psi_\alpha^\dagger(\boldsymbol{r})\, \psi_\alpha(\boldsymbol{r}) = |C|^2 \int d^3r = |C|^2 \times \infty = 1$$

はできない。そこで, 人為的に 1 辺 L の有限の立方体を繰り返しつないだものを考え, それぞれの壁のところで周期的境界条件を果たす。よく使われる周期的境界条件は

$$\psi(x,y,z) = \psi(x+L,y,z) = \psi(x,y+L,z) = \psi(x,y,z+L)$$

である。これから

$$\exp(ik_xL) = \exp(ik_yL) = \exp(ik_zL) = 1$$

したがって, n_x, n_y, n_z を任意整数として

$$k_x = \frac{2\pi}{L}n_x\,, \quad k_y = \frac{2\pi}{L}n_y\,, \quad k_z = \frac{2\pi}{L}n_z \tag{2.10}$$

となり $\boldsymbol{k}$ は飛び飛びの値になるが, $L \to \infty$ では連続的になる。規格化を 1 つの箱で行うことにすると $C = 1/\sqrt{V}$ である。ここで $V = L^3$ は箱の体積を表す。

パウリの原理から, 2 つのフェルミ粒子が同じ 1 粒子状態を占めることはできない。したがって, N 粒子系の基底状態はエネルギー的に低い N 個の 1 粒子状態が占有された状態である。このとき, 占有された状態のうち, 最大の k を k_F で表す。k_F を**フェルミ波数**という。占有された 1 粒子状態の数は粒子数に等しいから

$$N = \sum_{n_x}\sum_{n_y}\sum_{n_z}\sum_{\sigma=\pm 1/2} 1 = 2\sum_{n_x}\sum_{n_y}\sum_{n_z} 1 \tag{2.11}$$

である。ただし, 和は

$$k = \left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right)^{1/2} = \frac{2\pi}{L}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)^{1/2} \le k_\mathrm{F}$$

の条件を満たす $(n_x,\, n_y,\, n_z)$ について行う。この和を $\boldsymbol{k}$ の積分で置き換える。k_x は $\varDelta k_x = 2\pi/L$ おきに等間隔に並んでいる。したがって

$$\sum_{n_x} F(k_x) = \frac{L}{2\pi}\sum_{k_x} \varDelta k_x\, F(k_x) \xrightarrow{L\to\infty} \frac{L}{2\pi}\int dk_x\, F(k_x)$$

である。n_y, n_z についても同様であるから, 離散的な $\boldsymbol{k}$ についての和は積分

$$\sum_{\boldsymbol{k}} F(\boldsymbol{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3k\, F(\boldsymbol{k}) \tag{2.12}$$

で置き換えてよい。これを (2.11) に適用すると

$$N = \frac{2V}{(2\pi)^3}\int_{k\le k_{\rm F}} d^3k = \frac{V}{3\pi^2}k_{\rm F}^3$$

密度 $\rho = N/V$ は

$$\rho = \frac{k_{\rm F}^3}{3\pi^2}$$

で与えられる。基底状態のエネルギー E は

$$E = 2\sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m} = 2\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{\hbar^2}{2m}\int_{k\le k_{\rm F}} d^3k\, k^2 = \frac{V}{5\pi^2}\frac{\hbar^2 k_{\rm F}^5}{2m} = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2 k_{\rm F}^2}{2m}N$$

である。1 粒子あたりのエネルギー E/N はフェルミエネルギーの 3/5 になる。また, 圧力 P は

$$P = -\frac{\partial E}{\partial V} = -\frac{3}{5}\frac{\hbar^2}{2m}N\frac{\partial}{\partial V}\left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{2/3} = \frac{2}{5}\frac{\hbar^2 k_{\rm F}^2}{2m}\rho$$

になる。

問 2.1 $\rho(\boldsymbol{r})$ は $\rho(\boldsymbol{r}) = \sum_h \psi_h^\dagger(\boldsymbol{r})\psi_h(\boldsymbol{r})$ で定義される。この定義を用いて, ψ が (2.9) のとき $\rho = k_{\rm F}^3/(3\pi^2)$ になることを示せ。

2.4 交換項の自由粒子近似

Hartree–Fock 方程式において, Fock 項 (交換ポテンシャル) の扱いは非常に複雑である。この複雑さを避けるため, 例えば, 原子核構造を扱う場合には, 核子間に働く核力の短距離性を利用して核力をデルタ関数及びその微分で表したりする。ここでは, 原子での電子軌道に関して, 電子 – 電子間のクーロン力

$$v(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$$

の場合に, 波動関数を平面波で近似し局所的な交換ポテンシャルを求める。なお, 電磁気の単位系として MKS 単位系ではなく, CGS 静電単位系を用いる。無次元の微細構造定数 α を用いれば, 単位系に依らず

$$v(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \frac{\alpha\,\hbar c}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\,, \qquad \alpha = \frac{1}{137.036}$$

である。

平面波 (2.9) を使うと (ただし $C = 1/\sqrt{V}$), 交換項は

$$\begin{aligned} U_{\rm F} &= -\sum_{h'}\int d^3r'\psi_{h'}^\dagger(\boldsymbol{r}')\,v(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\,\psi_h(\boldsymbol{r}')\,\psi_{h'}(\boldsymbol{r}) \\ &= -\frac{e^2}{V^{3/2}}\sum_{\boldsymbol{k}'\sigma'}(\chi_{\sigma'}^\dagger\chi_\sigma)\,\chi_{\sigma'}\int d^3r'\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\exp\Big(i\Big(-\boldsymbol{k}'\!\cdot\!\boldsymbol{r}' + \boldsymbol{k}\!\cdot\!\boldsymbol{r}' + \boldsymbol{k}'\!\cdot\!\boldsymbol{r}\Big)\Big) \\ &= -\frac{e^2}{V^{3/2}}\exp(i\boldsymbol{k}\!\cdot\!\boldsymbol{r})\,\chi_\sigma\sum_{\boldsymbol{k}'}\int d^3r'\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\exp\Big(i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\!\cdot\!(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r})\Big) \end{aligned}$$

ここで $\boldsymbol{k}'$ の和は $k' \le k_{\rm F}$ である $\boldsymbol{k}'$ について行う。(2.12) を用いて和を積分で置き換えると

$$U_{\rm F} = -\frac{e^2}{(2\pi)^3}\frac{\exp(i\boldsymbol{k}\!\cdot\!\boldsymbol{r})}{\sqrt{V}}\chi_\sigma\int_0^{k_{\rm F}} d^3k'\int d^3r'\frac{\exp(i(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r})\!\cdot\!(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'))}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} = u_{\rm F}(\boldsymbol{k})\,\psi_h(\boldsymbol{r})$$

ただし

$$u_\mathrm{F}(\boldsymbol{k}) = -\frac{e^2}{(2\pi)^3}\int_0^{k_\mathrm{F}} d^3k' \int d^3r' \frac{\exp(i(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r})\cdot(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'))}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$$

である。$u_\mathrm{F}(\boldsymbol{k})$ が交換ポテンシャルになる。$\boldsymbol{r}'$ の積分領域は体積 V の箱であるが, 十分大きいとして全空間にする。また, 積分変数を $\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}$ に置き換えれば

$$u_\mathrm{F}(\boldsymbol{k}) = -\frac{e^2}{(2\pi)^3}\int_0^{k_\mathrm{F}} d^3k'\, I(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\,, \qquad \text{ただし} \quad I(\boldsymbol{q}) = \int d^3r\, \frac{\exp(i\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{q})}{r}$$

ここで

$$\exp(i\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{q}) = -\frac{1}{q^2}\boldsymbol{\nabla}^2\exp(i\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{q})\,, \qquad \boldsymbol{\nabla}^2\frac{1}{r} = -4\pi\,\delta(\boldsymbol{r})$$

を使い部分積分すると

$$I(\boldsymbol{q}) = -\frac{1}{q^2}\int d^3r\,\frac{1}{r}\,\boldsymbol{\nabla}^2\exp(i\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{q}) = -\frac{1}{q^2}\int d^3r\,\exp(i\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{q})\,\boldsymbol{\nabla}^2\frac{1}{r} = \frac{4\pi}{q^2} \tag{2.13}$$

になるから

$$u_\mathrm{F}(\boldsymbol{k}) = -\frac{2e^2}{(2\pi)^2}\int_0^{k_\mathrm{F}} d^3k' \frac{1}{|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'|^2}$$

である。$\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{k}'$ のなす角を θ とし, $t=\cos\theta$ とすると

$$\begin{aligned} u_\mathrm{F}(\boldsymbol{k}) &= -\frac{e^2}{\pi}\int_0^{k_\mathrm{F}} dk' k'^2 \int_{-1}^{1} dt\,\frac{1}{k^2+k'^2-2kk't} \\ &= -\frac{e^2}{\pi}\frac{1}{k}\int_0^{k_\mathrm{F}} dk'\,k'\Big(\log|k'+k| - \log|k'-k|\Big) \\ &= -\frac{e^2}{\pi}\frac{1}{k}\left[\frac{k'^2-k^2}{2}\log\left|\frac{k'+k}{k'-k}\right| + kk'\right]_{k'=0}^{k'=k_\mathrm{F}} \\ &= -\frac{e^2}{\pi}\,k_\mathrm{F}F(k/k_\mathrm{F}) \end{aligned} \tag{2.14}$$

ただし

$$F(x) = 1 + \frac{1-x^2}{2x}\log\left|\frac{1+x}{1-x}\right|$$

である。

u_F は k, つまり, 求めようとする 1 粒子状態に依存する。そこで, 全ての状態に共通のポテンシャルとして, これを平均したもの

$$u_\mathrm{F} = -\frac{e^2}{\pi}\,k_\mathrm{F}\,\frac{\displaystyle\int_0^{k_\mathrm{F}} d^3k\,F(k/k_\mathrm{F})}{\displaystyle\int_0^{k_\mathrm{F}} d^3k} = -\frac{e^2}{\pi}\,k_\mathrm{F}\,\frac{\displaystyle\int_0^1 dx\,x^2F(x)}{\displaystyle\int_0^1 dx\,x^2}$$

を用いよう。

$$\int_0^1 dx\,x^2F(x) = \frac{1}{3}+\frac{1}{2}\int_0^1 dx\,x\left(1-x^2\right)\log\frac{1+x}{1-x} = \frac{1}{3}+\frac{1}{2}\int_{-1}^1 dx\,x\left(1-x^2\right)\log\left(1+x\right)$$

及び

$$\int dx\,x\left(1-x^2\right)\log\left(1+x\right) = -\frac{1}{4}\left(x^2-1\right)^2\log\left(x+1\right) + \frac{1}{4}\int dx\,\left(x+1\right)\left(x-1\right)^2$$

より

$$\int_0^1 dx\, x^2 F(x) = \frac{1}{2} \tag{2.15}$$

であるから

$$u_{\rm F} = -\frac{3e^2}{2\pi}\,k_{\rm F} \tag{2.16}$$

になる。

原子での電子密度は空間的に一様ではなく $\boldsymbol{r}$ の関数であるが, 空間変化が緩やかで空間の各点で局所的にフェルミ波数 $k_{\rm F}$ が定義できるとする。これを**局所密度近似** (local density approximation) という。$\rho = k_{\rm F}^3/(3\pi^2)$ であるから

$$u_{\rm F}(\boldsymbol{r}) = -\frac{3}{2}\,e^2 \left(\frac{3}{\pi}\,\rho(\boldsymbol{r})\right)^{1/3}$$

になる。ハートリー・フォック方程式は原子核 (電荷 $+Ze$) とのクーロン力を考慮すると

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 - \frac{Ze^2}{r} + u_{\rm H}(\boldsymbol{r}) + u_{\rm F}(\boldsymbol{r})\right)\psi_h(\boldsymbol{r}) = \epsilon_h\,\psi_h(\boldsymbol{r})$$

ただし

$$u_{\rm H}(\boldsymbol{r}) = e^2\int d^3r'\,\frac{\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\,, \qquad \rho(\boldsymbol{r}) = \sum_h \psi_h^\dagger(\boldsymbol{r})\,\psi_h(\boldsymbol{r})$$

である。これを**ハートリー・フォック・スレーター方程式**という。

(2.16) はエネルギー $E_{\rm HF}$ を変分して得られた交換項を平面波で評価した。$E_{\rm HF}$ の交換項, すなわち

$$\frac{1}{2}\sum_{hh'}\overline{v}_{hh'\,hh'} = \frac{1}{2}\sum_{hh'}\langle h^{(1)}h'^{(2)}|\,v(1,2)\,|h^{(1)}h'^{(2)}\rangle - \frac{1}{2}\sum_{hh'}\langle h^{(1)}h'^{(2)}|\,v(1,2)\,|h'^{(1)}h^{(2)}\rangle$$

の右辺第 2 項をまず平面波で求めその後で変分すると, 結果は (2.16) とは 3/2 だけ異なり

$$u_{\rm F}(\boldsymbol{r}) = -\,e^2\left(\frac{3}{\pi}\,\rho(\boldsymbol{r})\right)^{1/3} \tag{2.17}$$

になる。パラメータ α を導入して

$$u_{\rm F}(\boldsymbol{r}) = -\,\alpha\,e^2\left(\frac{3}{\pi}\,\rho(\boldsymbol{r})\right)^{1/3}, \qquad \alpha \approx 1 \sim 3/2$$

とし実験を再現するように α を調節する手法を Xα 法という。

問 2.2　(2.17) を求める。簡単のため

$$\langle \alpha^{(1)}\beta^{(2)}|\,v(1,2)\,|\alpha'^{(1)}\beta'^{(2)}\rangle = \langle\alpha\beta|\,v\,|\alpha'\beta'\rangle$$

と書く。v は電子–電子間のクーロン力である。(2.13), (2.14), (2.15) を用いてよい。

1. $E_{\rm HF}$ の交換項に現れる行列要素 $\langle \boldsymbol{k}\sigma, \boldsymbol{k}'\sigma'|\,v\,|\boldsymbol{k}'\sigma', \boldsymbol{k}\sigma\rangle$ が

$$\langle \boldsymbol{k}\sigma, \boldsymbol{k}'\sigma'|\,v\,|\boldsymbol{k}'\sigma', \boldsymbol{k}\sigma\rangle = \delta_{\sigma\sigma'}\,\frac{4\pi e^2}{V}\,\frac{1}{|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'|^2}$$

になることを示せ。

2. 前問の結果から

$$E_{\rm ex} \equiv -\frac{1}{2}\sum_{|\boldsymbol{k}|\le k_{\rm F}}\sum_{|\boldsymbol{k}'|\le k_{\rm F}}\sum_{\sigma\sigma'}\langle \boldsymbol{k}\sigma, \boldsymbol{k}'\sigma'|\, v\,|\boldsymbol{k}'\sigma', \boldsymbol{k}\sigma\rangle = -\frac{3}{4}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} e^2\,\rho^{4/3}\,V$$

を示せ。

3. $\rho^{4/3}\,V$ は

$$\rho^{4/3}\,V = \int d^3r\,\rho^{4/3}$$

であるが, 密度 ρ が $\boldsymbol{r}$ の関数 $\rho(\boldsymbol{r})$ の場合にも, 積分表現はよい近似で成り立つとする。占有状態の 1 つ $|\,h\,\rangle$ の変分を考える。変分では波動関数 ψ_h と $\psi_h^\dagger$ は独立に扱ってよい。$\psi_h^\dagger$ を $\delta\psi^\dagger$ だけ変化させたとき, $E_{\rm ex}$ の変化 $\delta E_{\rm ex}$ は

$$\delta E_{\rm ex} = \int d^3r\,\delta\psi^\dagger(\boldsymbol{r})\,u_{\rm F}(\boldsymbol{r})\,\psi_h(\boldsymbol{r})$$

と表せる。$u_{\rm F}$ を求めよ。

2.5 ウィックの定理

第二量子化により多体問題を扱う場合, ウィックの定理は非常に便利な道具になる。

生成演算子と消滅演算子の任意個の積 $ABC\cdots Z$ を考える。すべての消滅演算子がすべての生成演算子の右にくるように並べ替えた積を考える。この積が最初の $AB\cdots Z$ から奇置換で得られる場合は -1, 偶置換ならば $+1$ の符号を付ける。これを**正規積** (normal product) といい

$$:ABC\cdots Z: \quad \text{または} \quad \mathrm{N}(ABC\cdots Z)$$

で表す。

生成・消滅演算子はどのような真空を考えるかで変わりうる。本来の真空 $|\,0\,\rangle$ のときは, すべての α に対して a_α が消滅演算子である。したがって, 例えば

$$:a_p^\dagger a_h^\dagger a_{h'} a_{p'}: = a_p^\dagger a_h^\dagger a_{h'} a_{p'}$$

である。一方, HF 基底状態 $|\;\rangle$ を真空として採用した場合, (2.7) で定義した $b^\dagger$, b が生成・消滅演算子になるから

$$:a_p^\dagger a_h^\dagger a_{h'} a_{p'}: = :b_p^\dagger b_h b_{h'}^\dagger b_{p'}: = -\,b_p^\dagger b_{h'}^\dagger b_h b_{p'} = -\,a_p^\dagger a_{h'} a_h^\dagger a_{p'}$$

である。

一般に, 真空を $|\,{\rm vac}\rangle$, 消滅演算子を c とするとき, 正規積が消滅演算子を 1 つでも含むならば $\cdots c\,|\,{\rm vac}\,\rangle = 0$ である。また, 全く含まない場合は $\langle{\rm vac}|\,c^\dagger\cdots = 0$ である。いずれにしろ, 正規積の真空期待値は 0 である。

縮約 (contraction) $\overset{\sqcap}{AB}$ を

$$AB =: AB: + \overset{\sqcap}{AB}$$

で定義する。AB と $:AB:$ の差 $\overset{\sqcap}{AB}$ は数であるから, 真空期待値を $\langle\;\;\rangle$ で表すことにすると

$$\langle AB\rangle = \langle :AB:\rangle + \overset{\sqcap}{AB}\,\langle\,{\rm vac}\,|\,{\rm vac}\,\rangle = \overset{\sqcap}{AB}$$

縮約は真空期待値である。実際

$$
:c_\alpha\, c_\beta: + \langle c_\alpha\, c_\beta\rangle = c_\alpha\, c_\beta + 0 = c_\alpha\, c_\beta\,, \qquad :c_\alpha^\dagger\, c_\beta^\dagger: + \langle c_\alpha^\dagger\, c_\beta^\dagger\rangle = c_\alpha^\dagger\, c_\beta^\dagger + 0 = c_\alpha^\dagger\, c_\beta^\dagger
$$
$$
:c_\alpha^\dagger\, c_\beta: + \langle c_\alpha^\dagger\, c_\beta\rangle = c_\alpha^\dagger\, c_\beta + 0 = c_\alpha^\dagger\, c_\beta\,, \qquad :c_\alpha\, c_\beta^\dagger: + \langle c_\alpha\, c_\beta^\dagger\rangle = -\, c_\beta^\dagger\, c_\alpha + \delta_{\alpha\beta} = c_\alpha\, c_\beta^\dagger
$$

である。

ウィックの定理　任意の生成・消滅演算子の積 $ABC\cdots Z$ は, 可能な全ての縮約を含む正規積

$$
\begin{aligned}
ABC\cdots Z = {} & :AB\cdots Z: + :\wick{\c A \c B}\, C\cdots Z: + :\wick{\c A B \c C}\cdots Z: + \cdots \\
& + :\wick{\c A \c B}\,\wick{\c C \c D}\, E\cdots Z: + :\wick{\c1 A \c2 B \c1 C \c2 D}\, E\cdots Z: + \cdots \\
& + :\wick{\c A \c B}\,\wick{\c C \c D}\,\wick{\c E \c F}\, G\cdots Z: + \cdots
\end{aligned}
$$

に展開できる。ただし, 縮約を正規積から取り出すとき, 縮約する 2 つの演算子の間に奇数個の演算子がある場合には $-$ の符号を付ける。例えば

$$
:\wick{\c A B \c C}\cdots Z: = -\,\wick{\c A \c C} :B\cdots Z:\,, \qquad :\wick{\c A B C \c D}\cdots Z: = \wick{\c A \c D} :BC\cdots Z:
$$
$$
:\wick{\c1 A \c2 B \c1 C \c2 D}\, E\cdots Z: = -\,\wick{\c A \c C} :\wick{\c B \c D}\, E\cdots Z: = -\,\wick{\c A \c C}\,\wick{\c B \c D} :E\cdots Z:
$$

である。

証明　2 つの積の場合は縮約の定義であるから, 3 つの積を考える。

$$
\begin{aligned}
ABC &= :ABC: + :\wick{\c A \c B C}: + :\wick{\c A B \c C}: + :\wick{A \c B \c C}: \\
&= :ABC: + \langle AB\rangle C - \langle AC\rangle B + \langle BC\rangle A
\end{aligned}
\tag{2.18}
$$

が成り立つことを示す。2 つの積に消滅演算子 c_α を加える場合, 任意に演算子 A に対して $\langle A\, c_\alpha\rangle = 0$ であるから

$$
\begin{aligned}
ABc_\alpha = \Big(:AB: + \langle AB\rangle\Big)c_\alpha &= :ABc_\alpha: + \langle AB\rangle\, c_\alpha \\
&= :ABc_\alpha: + \langle AB\rangle\, c_\alpha - \langle Ac_\alpha\rangle B + \langle Bc_\alpha\rangle A
\end{aligned}
$$

したがって, (2.18) は成り立つ。$c_\alpha^\dagger$ を加える場合

$$
Bc_\alpha^\dagger = :Bc_\alpha^\dagger: + \langle Bc_\alpha^\dagger\rangle = -\, c_\alpha^\dagger B + \langle Bc_\alpha^\dagger\rangle
$$

であるから

$$
ABc_\alpha^\dagger = -\, Ac_\alpha^\dagger B + A\langle Bc_\alpha^\dagger\rangle = -\Big(-\, c_\alpha^\dagger A + \langle Ac_\alpha^\dagger\rangle\Big)B + A\langle Bc_\alpha^\dagger\rangle = c_\alpha^\dagger AB - \langle Ac_\alpha^\dagger\rangle B + A\langle Bc_\alpha^\dagger\rangle
$$

$AB = :AB: + \langle AB\rangle$, $c_\alpha^\dagger :AB: = :ABc_\alpha^\dagger:$ であるから

$$
ABc_\alpha^\dagger = :ABc_\alpha^\dagger: + \langle AB\rangle\, c_\alpha^\dagger - \langle Ac_\alpha^\dagger\rangle B + A\langle Bc_\alpha^\dagger\rangle
$$

になり (2.18) が成り立つ。以下同様にして, 一般に n 個の積の場合もウィックの定理が成り立つことを示せる。

ウィックの定理を使うとき, 最初から同一の正規積にある演算子の縮約は寄与しないので考えない。例えば

$$
\begin{aligned}
A:BC: &= A\,(BC - \langle BC\rangle) \\
&= :ABC: + :\wick{\c A \c B C}: + :\wick{\c A B \c C}: + :\wick{A \c B \c C}: - A\langle BC\rangle \\
&= :ABC: + :\wick{\c A \c B C}: + :\wick{\c A B \c C}:
\end{aligned}
$$

であり, $\wick{\c B \c C}$ は寄与しない。

真空として HF 基底状態 $|\,\rangle$ を考える。ウィックの定理を使うと

$$
\begin{aligned}
a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'} &= :a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'}: + :\wick{\c a_\alpha^\dagger \c a_\beta^\dagger} a_{\beta'} a_{\alpha'}: + :\wick{\c a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger \c a_{\beta'}} a_{\alpha'}: + :\wick{\c a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} \c a_{\alpha'}}: \\
&\quad + :a_\alpha^\dagger \wick{\c a_\beta^\dagger \c a_{\beta'}} a_{\alpha'}: + :a_\alpha^\dagger \wick{\c a_\beta^\dagger a_{\beta'} \c a_{\alpha'}}: + :a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger \wick{\c a_{\beta'} \c a_{\alpha'}}: \\
&\quad + :\wick{\c1 a_\alpha^\dagger \c1 a_\beta^\dagger \c2 a_{\beta'} \c2 a_{\alpha'}}: + :\wick{\c1 a_\alpha^\dagger \c2 a_\beta^\dagger \c1 a_{\beta'} \c2 a_{\alpha'}}: + :\wick{\c1 a_\alpha^\dagger \c2 a_\beta^\dagger \c2 a_{\beta'} \c1 a_{\alpha'}}:
\end{aligned}
$$

$\langle\,|a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger|\,\rangle = \langle\,|a_\alpha a_\beta|\,\rangle = 0$ であるから

$$
\begin{aligned}
a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'} &= :a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'}: - \langle\,|a_\alpha^\dagger a_{\beta'}|\,\rangle :a_\beta^\dagger a_{\alpha'}: + \langle\,|a_\alpha^\dagger a_{\alpha'}|\,\rangle :a_\beta^\dagger a_{\beta'}: \\
&\quad + \langle\,|a_\beta^\dagger a_{\beta'}|\,\rangle :a_\alpha^\dagger a_{\alpha'}: - \langle\,|a_\beta^\dagger a_{\alpha'}|\,\rangle :a_\alpha^\dagger a_{\beta'}: \\
&\quad + \langle\,|a_\beta^\dagger a_{\beta'}|\,\rangle\langle\,|a_\alpha^\dagger a_{\alpha'}|\,\rangle - \langle\,|a_\beta^\dagger a_{\alpha'}|\,\rangle\langle\,|a_\alpha^\dagger a_{\beta'}|\,\rangle
\end{aligned}
$$

になる。

$$
V_{\rm res} = \frac{1}{4}\sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \overline{v}_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'} :a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'}: \tag{2.19}
$$

とおき, $\overline{v}$ の反対称性及び (2.3) を使うと

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{4}\sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \overline{v}_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'}\, a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'} &= \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \overline{v}_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'} \left(\langle\,|a_\beta^\dagger a_{\beta'}|\,\rangle :a_\alpha^\dagger a_{\alpha'}: + \frac{1}{2}\langle\,|a_\beta^\dagger a_{\beta'}|\,\rangle\langle\,|a_\alpha^\dagger a_{\alpha'}|\,\rangle \right) + V_{\rm res} \\
&= \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \overline{v}_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'} \left(\langle\,|a_\beta^\dagger a_{\beta'}|\,\rangle\, a_\alpha^\dagger a_{\alpha'} - \frac{1}{2}\langle\,|a_\beta^\dagger a_{\beta'}|\,\rangle\langle\,|a_\alpha^\dagger a_{\alpha'}|\,\rangle \right) + V_{\rm res} \\
&= \sum_{\alpha\beta h} \overline{v}_{\alpha h\,\alpha' h}\, a_\alpha^\dagger a_{\alpha'} - \frac{1}{2}\sum_{hh'} \overline{v}_{hh'\,hh'} + V_{\rm res}
\end{aligned}
$$

この結果と (2.5) から, ハミルトニアン (2.2) は

$$
\begin{aligned}
H &= \sum_{\alpha\alpha'} \left(t_{\alpha\alpha'} + \sum_h \overline{v}_{\alpha h\,\alpha' h} \right) a_\alpha^\dagger a_{\alpha'} - \frac{1}{2}\sum_{hh'} \overline{v}_{hh'\,hh'} + V_{\rm res} \\
&= \sum_{\alpha\alpha'} \langle\alpha|h_{\rm HF}|\alpha'\rangle\, a_\alpha^\dagger a_{\alpha'} - \frac{1}{2}\sum_{hh'} \overline{v}_{hh'\,hh'} + V_{\rm res}
\end{aligned}
$$

になる。1 粒子状態がハートリー・フォック方程式 (2.6) を満たすならば

$$
H = \sum_\alpha \epsilon_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha - \frac{1}{2}\sum_{hh'} \overline{v}_{hh'\,hh'} + V_{\rm res} = \sum_\alpha \epsilon_\alpha :a_\alpha^\dagger a_\alpha: + V_{\rm res} + E_{\rm HF} \tag{2.20}
$$

である。(2.7) の $b^\dagger$ を使うと

$$
\sum_\alpha \epsilon_\alpha :a_\alpha^\dagger a_\alpha: = \sum_p \epsilon_p :b_p^\dagger b_p: + \sum_h \epsilon_h :b_h b_h^\dagger: = \sum_p \epsilon_p b_p^\dagger b_p - \sum_h \epsilon_h b_h^\dagger b_h
$$

であるから

$$\sum_\alpha \epsilon_\alpha : a^\dagger_\alpha a_\alpha : |\,\rangle = 0$$

一方, $V_{\rm res}$ には $: a^\dagger_p a^\dagger_{p'} a_h a_{h'} : = b^\dagger_p b^\dagger_{p'} b^\dagger_h b^\dagger_{h'}$ という項があるから $V_{\rm res}|\,\rangle \neq 0$ である。したがって, $V_{\rm res}$ を無視すれば

$$H\,|\,\rangle = E_{\rm HF}\,|\,\rangle$$

であり, HF 基底状態は H の固有状態になり固有値は (2.8) の $E_{\rm HF}$ である。ハートリー・フォック近似は $V_{\rm res}$ を無視する近似である。$V_{\rm res}$ を**残留相互作用** (residual interaction) という。

2.6 残留相互作用の分類

残留相互作用 (2.19) における正規積は, HF 基底状態を真空とした場合であるから (2.7) で定義した $b^\dagger_\alpha$ が生成演算子になる。これを用いて $V_{\rm res}$ を表す。$\overline{v}_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'}$ の添字を粒子と空孔に分け, 空孔を k 個 ($k=0 \sim 4$) 含む部分にまとめると

$$V_{\rm res} = V_0 + V_1 + V_2 + V_3 + V_4$$

ただし

$$V_{\rm pp} = V_0 = \frac{1}{4}\sum \overline{v}_{p_1p_2\,p'_1p'_2} : a^\dagger_{p_1} a^\dagger_{p_2} a_{p'_2} a_{p'_1} : = \frac{1}{4}\sum \overline{v}_{p_1p_2\,p'_1p'_2}\, b^\dagger_{p_1} b^\dagger_{p_2} b_{p'_2} b_{p'_1}$$

$$V_{\rm hh} = V_4 = \frac{1}{4}\sum \overline{v}_{h_1h_2\,h'_1h'_2} : a^\dagger_{h_1} a^\dagger_{h_2} a_{h'_2} a_{h'_1} : = \frac{1}{4}\sum \overline{v}_{h_1h_2\,h'_1h'_2}\, b^\dagger_{h'_2} b^\dagger_{h'_1} b_{h_1} b_{h_2}$$

及び

$$\begin{aligned}
V_1 &= \frac{1}{4}\sum \Big(\overline{v}_{h_1p_1\,p'_1p'_2} : a^\dagger_{h_1} a^\dagger_{p_1} a_{p'_2} a_{p'_1} : + \overline{v}_{p_1h_1\,p'_1p'_2} : a^\dagger_{p_1} a^\dagger_{h_1} a_{p'_2} a_{p'_1} : \\
&\qquad + \overline{v}_{p_1p_2\,h'_1p'_1} : a^\dagger_{p_1} a^\dagger_{p_2} a_{p'_1} a_{h'_1} : + \overline{v}_{p_1p_2\,p'_1h'_1} : a^\dagger_{p_1} a^\dagger_{p_2} a_{h'_1} a_{p'_1} : \Big) \\
&= \frac{1}{2}\sum \Big(\overline{v}_{p_1h_1\,p'_1p'_2} : a^\dagger_{p_1} a^\dagger_{h_1} a_{p'_2} a_{p'_1} : + \overline{v}_{p'_1p'_2\,p_1h_1} : a^\dagger_{p'_1} a^\dagger_{p'_2} a_{h_1} a_{p_1} : \Big) \\
V_2 &= \frac{1}{4}\sum \Big(\overline{v}_{h_1h_2\,p'_1p'_2} : a^\dagger_{h_1} a^\dagger_{h_2} a_{p'_2} a_{p'_1} : + \overline{v}_{h_1p_1\,h'_1p'_1} : a^\dagger_{h_1} a^\dagger_{p_1} a_{p'_1} a_{h'_1} : \\
&\qquad + \overline{v}_{h_1p_1\,p'_1h'_1} : a^\dagger_{h_1} a^\dagger_{p_1} a_{h'_1} a_{p'_1} : + \overline{v}_{p_1h_1\,h'_1p'_1} : a^\dagger_{p_1} a^\dagger_{h_1} a_{p'_1} a_{h'_1} : \\
&\qquad + \overline{v}_{p_1h_1\,p'_1h'_1} : a^\dagger_{p_1} a^\dagger_{h_1} a_{h'_1} a_{p'_1} : + \overline{v}_{p_1p_2\,h'_1h'_2} : a^\dagger_{p_1} a^\dagger_{p_2} a_{h'_2} a_{h'_1} : \Big) \\
&= \sum \overline{v}_{p_1h_1\,h'_1p'_1} : a^\dagger_{p_1} a^\dagger_{h_1} a_{p'_1} a_{h'_1} : \\
&\qquad + \frac{1}{4}\sum \Big(\overline{v}_{h_1h_2\,p_1p_2} : a^\dagger_{h_1} a^\dagger_{h_2} a_{p_2} a_{p_1} : + \overline{v}_{p_1p_2\,h_1h_2} : a^\dagger_{p_1} a^\dagger_{p_2} a_{h_2} a_{h_1} : \Big) \\
V_3 &= \frac{1}{4}\sum \Big(\overline{v}_{p_1h_1\,h'_1h'_2} : a^\dagger_{p_1} a^\dagger_{h_1} a_{h'_2} a_{h'_1} : + \overline{v}_{h_1p_1\,h'_1h'_2} : a^\dagger_{h_1} a^\dagger_{p_1} a_{h'_2} a_{h'_1} : \\
&\qquad + \overline{v}_{h_1h_2\,p'_1h'_1} : a^\dagger_{h_1} a^\dagger_{h_2} a_{h'_1} a_{p'_1} : + \overline{v}_{h_1h_2\,h'_1p'_1} : a^\dagger_{h_1} a^\dagger_{h_2} a_{p'_1} a_{h'_1} : \Big) \\
&= \frac{1}{2}\sum \Big(\overline{v}_{p_1h_1\,h'_1h'_2} : a^\dagger_{p_1} a^\dagger_{h_1} a_{h'_2} a_{h'_1} : + \overline{v}_{h'_1h'_2\,p_1h_1} : a^\dagger_{h'_1} a^\dagger_{h'_2} a_{h_1} a_{p_1} : \Big)
\end{aligned}$$

である。V_2 を 2 つに分割して（V_{ph} では h_1 と h'_1 を入れ替え添字 1 を除く）

$$V_{\mathrm{ph}} = \sum \overline{v}_{ph'\,hp'} :a^\dagger_p a^\dagger_{h'} a_{p'} a_h: = \sum \overline{v}_{ph'\,hp'} :b^\dagger_p b_{h'} b_{p'} b^\dagger_h: = \sum \overline{v}_{ph'\,hp'}\, b^\dagger_p b^\dagger_h b_{h'} b_{p'}$$

$$\begin{aligned} V_{\mathrm{V}} &= \frac{1}{4}\sum\Big(\overline{v}_{h_1h_2\,p_1p_2} :a^\dagger_{h_1} a^\dagger_{h_2} a_{p_2} a_{p_1}: + \overline{v}_{p_1p_2\,h_1h_2} :a^\dagger_{p_1} a^\dagger_{p_2} a_{h_2} a_{h_1}:\Big) \\ &= \frac{1}{4}\sum\Big(\overline{v}_{h_1h_2\,p_1p_2}\, b_{h_1} b_{h_2} b_{p_2} b_{p_1} + \overline{v}_{p_1p_2\,h_1h_2}\, b^\dagger_{p_1} b^\dagger_{p_2} b^\dagger_{h_2} b^\dagger_{h_1}\Big) \end{aligned}$$

とする。また, V_1 と V_3 を合わせて

$$\begin{aligned} V_{\mathrm{Y}} = V_1 + V_3 &= \frac{1}{2}\sum\Big(\overline{v}_{p_1h_1\,p'_1p'_2} :a^\dagger_{p_1} a^\dagger_{h_1} a_{p'_2} a_{p'_1}: + \overline{v}_{p'_1p'_2\,p_1h_1} :a^\dagger_{p'_1} a^\dagger_{p'_2} a_{h_1} a_{p_1}: \\ &\qquad + \overline{v}_{p_1h_1\,h'_1h'_2} :a^\dagger_{p_1} a^\dagger_{h_1} a_{h'_2} a_{h'_1}: + \overline{v}_{h'_1h'_2\,p_1h_1} :a^\dagger_{h'_1} a^\dagger_{h'_2} a_{h_1} a_{p_1}:\Big) \\ &= \frac{1}{2}\sum\Big(\overline{v}_{p_1h_1\,p'_1p'_2}\, b^\dagger_{p_1} b_{h_1} b_{p'_2} b_{p'_1} + \overline{v}_{p'_1p'_2\,p_1h_1}\, b^\dagger_{p'_1} b^\dagger_{p'_2} b^\dagger_{h_1} b_{p_1} \\ &\qquad + \overline{v}_{p_1h_1\,h'_1h'_2}\, b^\dagger_{p_1} b^\dagger_{h'_2} b^\dagger_{h'_1} b_{h_1} + \overline{v}_{h'_1h'_2\,p_1h_1}\, b^\dagger_{h_1} b_{h'_1} b_{h'_2} b_{p_1}\Big) \\ &= \frac{1}{2}\sum\Big(\overline{v}_{p_1h_1\,p'_1p'_2}\, b^\dagger_{p_1} b_{h_1} b_{p'_2} b_{p'_1} + \overline{v}_{p_1h_1\,h'_1h'_2}\, b^\dagger_{p_1} b^\dagger_{h'_2} b^\dagger_{h'_1} b_{h_1} + (\mathrm{h.c.})\Big) \end{aligned}$$

とする。(h.c.) はエルミート共役である。以上をまとめると

$$V_{\mathrm{res}} = V_{\mathrm{pp}} + V_{\mathrm{hh}} + V_{\mathrm{ph}} + V_{\mathrm{V}} + V_{\mathrm{Y}} \tag{2.21}$$

ただし

$$V_{\mathrm{pp}} = \frac{1}{4}\sum \overline{v}_{p_1p_2\,p'_1p'_2}\, b^\dagger_{p_1} b^\dagger_{p_2} b_{p'_2} b_{p'_1} \tag{2.22}$$

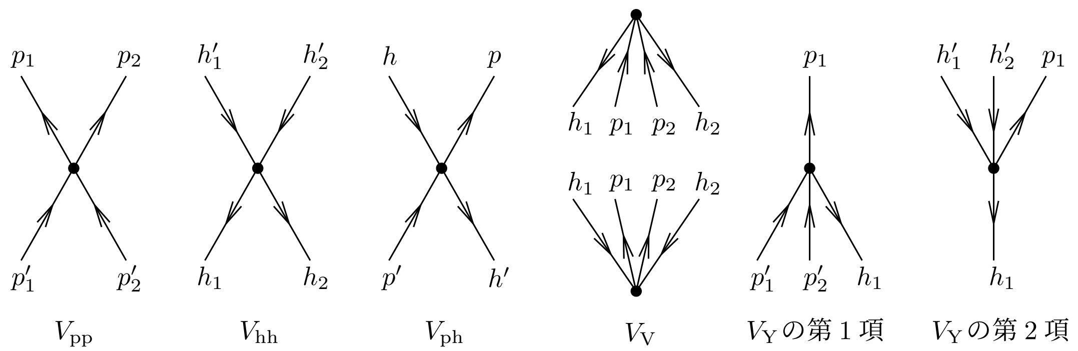
$$V_{\mathrm{hh}} = \frac{1}{4}\sum \overline{v}_{h_1h_2\,h'_1h'_2}\, b^\dagger_{h'_2} b^\dagger_{h'_1} b_{h_1} b_{h_2} \tag{2.23}$$

$$V_{\mathrm{ph}} = \sum \overline{v}_{ph'\,hp'}\, b^\dagger_p b^\dagger_h b_{h'} b_{p'} \tag{2.24}$$

$$V_{\mathrm{V}} = \frac{1}{4}\sum\Big(\overline{v}_{h_1h_2\,p_1p_2}\, b_{h_1} b_{h_2} b_{p_2} b_{p_1} + \overline{v}_{p_1p_2\,h_1h_2}\, b^\dagger_{p_1} b^\dagger_{p_2} b^\dagger_{h_2} b^\dagger_{h_1}\Big) \tag{2.25}$$

$$V_{\mathrm{Y}} = \frac{1}{2}\sum\Big(\overline{v}_{p_1h_1\,p'_1p'_2}\, b^\dagger_{p_1} b_{h_1} b_{p'_2} b_{p'_1} + \overline{v}_{p_1h_1\,h'_1h'_2}\, b^\dagger_{p_1} b^\dagger_{h'_2} b^\dagger_{h'_1} b_{h_1} + (\mathrm{h.c.})\Big) \tag{2.26}$$

である。V_{res} の各部分の機能をダイヤグラムで表す。粒子状態を上向きの矢印, 空孔状態を下向きの矢印で表し, $\overline{v}$ を $\bullet$ で表す。



V_{pp}　V_{hh}　V_{ph}　V_{V}　V_{Y} の第 1 項　V_{Y} の第 2 項

V_{pp} は粒子 p'_1 , p'_2 を消滅させて, 粒子 p_1 , p_2 を生成する粒子–粒子の散乱である。これをダイヤグ

ラムで書けば図の最左図になる（図は下から上に読む）。他の項も同様にして

$V_{\rm pp}$： 粒子–粒子散乱　　$V_{\rm hh}$： 空孔–空孔散乱　　$V_{\rm ph}$： 粒子–空孔散乱

$V_{\rm V}$ ：2 個の粒子–空孔対の生成・消滅

$V_{\rm Y}$ ：粒子あるいは空孔散乱に伴う粒子–空孔対の生成・消滅

である。$\overline{v}_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'}$ のブラ側にある状態 α, β は $\bullet$ から出て行く方向に, ケット側にある状態 α', β' は入って来る方向に矢印を引くことになる。ただし, 粒子状態は上向き, 空孔状態は下向きの矢印である。

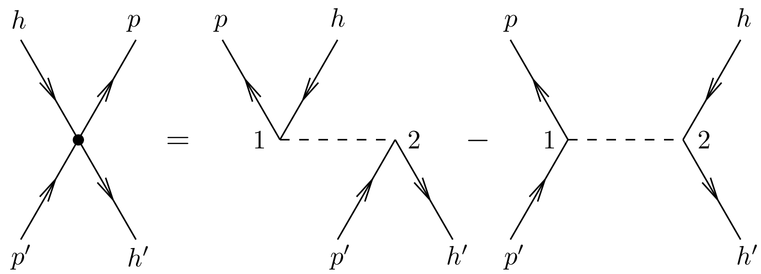
$\overline{v}$ は反対象化した行列要素

$$\overline{v}_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'} = \langle \alpha^{(1)}\beta^{(2)}|\, v(1,2)\,|\alpha'^{(1)}\beta'^{(2)}\rangle - \langle \alpha^{(1)}\beta^{(2)}|\, v(1,2)\,|\beta'^{(1)}\alpha'^{(2)}\rangle$$

である。$v(1,2)$ を $1\,----\,2$ で表すと, 例えば

$$\begin{aligned} V_{\rm ph} &= \sum \overline{v}_{ph'\,hp'}\, b_p^\dagger b_h^\dagger b_{h'} b_{p'} \\ &= \sum \left(\langle p^{(1)} h'^{(2)}|\, v(1,2)\,|h^{(1)} p'^{(2)}\rangle - \langle p^{(1)} h'^{(2)}|\, v(1,2)\,|p'^{(1)} h^{(2)}\rangle \right) b_p^\dagger b_h^\dagger b_{h'} b_{p'} \end{aligned}$$

において, 第 1 項では p, h は粒子 1 , p' , h' は粒子 2 の状態であり, 第 2 項では p, p' は粒子 1 , h , h' は粒子 2 の状態であるから



と表せる。粒子–空孔散乱には, 粒子–空孔対の生成・消滅が起こる第 1 項と, 粒子と空孔が散乱する第 2 項がある。他の項も $v(1,2)$ を用いたダイヤグラムで表せる。

基底状態相関　HF 基底状態 $|\,\rangle$ に対する $V_{\rm res}$ の効果を摂動論で扱う。全ハミルトニアン H は

$$H = H_0 + V_{\rm res}\,, \qquad H_0 = \sum_\alpha \epsilon_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha - \frac{1}{2}\sum \overline{v}_{hh'\,hh'}$$

である。$|\,\rangle$ は

$$H_0|\,\rangle = E_{\rm HF}|\,\rangle$$

を満たす。

$$H_0 a_\alpha^\dagger - a_\alpha^\dagger H_0 = \sum_\beta \epsilon_\beta \left(a_\beta^\dagger a_\beta a_\alpha^\dagger - a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\beta \right) = \sum_\beta \epsilon_\beta \left(a_\beta^\dagger \delta_{\alpha\beta} - a_\beta^\dagger a_\alpha^\dagger a_\beta - a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\beta \right) = \epsilon_\alpha a_\alpha^\dagger$$

これのエルミート共役をとれば

$$H_0 a_\alpha - a_\alpha H_0 = -\,\epsilon_\alpha a_\alpha$$

である。したがって

$$H_0 a_\alpha^\dagger a_\beta = \left(\epsilon_\alpha a_\alpha^\dagger + a_\alpha^\dagger H_0 \right) a_\beta = \epsilon_\alpha a_\alpha^\dagger a_\beta + a_\alpha^\dagger \left(-\epsilon_\beta a_\beta + a_\beta H_0 \right) = \left(\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta \right) a_\alpha^\dagger a_\beta + a_\alpha^\dagger a_\beta H_0$$

これから

$$H_0\, a_p^\dagger a_h|\,\rangle = (\epsilon_p - \epsilon_h + E_{\rm HF})\, a_p^\dagger a_h|\,\rangle$$

1 粒子・1 空孔状態 $a_p^\dagger a_h|\,\rangle$ は H_0 の固有状態で固有値は $\epsilon_p - \epsilon_h + E_{\rm HF}$, つまり, 励起エネルギーは $\epsilon_p - \epsilon_h$ である。一般に, n 粒子・m 空孔状態は H_0 の固有状態

$$H_0\, a_{p_1}^\dagger \cdots a_{p_n}^\dagger a_{h_1} \cdots a_{h_m}|\,\rangle = \left(\sum_{i=1}^{n} \epsilon_{p_i} - \sum_{i=1}^{m} \epsilon_{h_i} + E_{\rm HF} \right) a_{p_1}^\dagger \cdots a_{p_n}^\dagger a_{h_1} \cdots a_{h_m}|\,\rangle$$

である。

摂動展開すると $|\,\rangle$ は

$$|\,\tilde{}\,\rangle = \left(1 + \frac{1}{E_{\rm HF} - H_0}\, V_{\rm res} + \cdots \right) |\,\rangle$$

になる。$b_\alpha|\,\rangle = 0$ より, $V_{\rm res}$ で b_α を 1 つでも含む部分は寄与しない。したがって, $V_{\rm V}$ の第 2 項目

$$\frac{1}{4} \sum \overline{v}_{p_1 p_2\, h_1 h_2}\, b_{p_1}^\dagger b_{p_2}^\dagger b_{h_2}^\dagger b_{h_1}^\dagger = \frac{1}{4} \sum \overline{v}_{p_1 p_2\, h_1 h_2}\, a_{p_1}^\dagger a_{p_2}^\dagger a_{h_2} a_{h_1}$$

だけが寄与する。これから

$$|\,\tilde{}\,\rangle = \left(1 + \frac{1}{4} \sum \overline{v}_{p_1 p_2\, h_1 h_2} \frac{1}{E_{\rm HF} - H_0}\, a_{p_1}^\dagger a_{p_2}^\dagger a_{h_2} a_{h_1} + \cdots \right) |\,\rangle$$

になる。

$$(E_{\rm HF} - H_0)\, a_{p_1}^\dagger a_{p_2}^\dagger a_{h_2} a_{h_1}|\,\rangle = -\left(\epsilon_{p_1} + \epsilon_{p_2} - \epsilon_{h_1} - \epsilon_{h_2}\right)\, a_{p_1}^\dagger a_{p_2}^\dagger a_{h_2} a_{h_1}|\,\rangle$$

より

$$\frac{1}{E_{\rm HF} - H_0}\, a_{p_1}^\dagger a_{p_2}^\dagger a_{h_2} a_{h_1}|\,\rangle = -\frac{1}{\epsilon_{p_1} + \epsilon_{p_2} - \epsilon_{h_1} - \epsilon_{h_2}}\, a_{p_1}^\dagger a_{p_2}^\dagger a_{h_2} a_{h_1}|\,\rangle$$

であるから

$$|\,\tilde{}\,\rangle = |\,\rangle - \frac{1}{4} \sum \frac{\overline{v}_{p_1 p_2\, h_1 h_2}}{\epsilon_{p_1} + \epsilon_{p_2} - \epsilon_{h_1} - \epsilon_{h_2}}\, a_{p_1}^\dagger a_{p_2}^\dagger a_{h_2} a_{h_1}|\,\rangle + \cdots$$

基底状態には 2 粒子・2 空孔状態が混ざりる。$a_h^\dagger a_p|\,\rangle = 0$ であるが $a_h^\dagger a_p|\,\tilde{}\,\rangle \neq 0$ である。フェルミ面はぼやける。

1 粒子・1 空孔状態 $a_p^\dagger a_h|\,\rangle$ は混ざらない。これは $|\alpha\rangle$ が HF 方程式

$$\Big(t + u_{\rm HF} \Big) |\alpha\rangle = \epsilon_\alpha |\alpha\rangle$$

を満たすからである。適当なポテンシャル u_0 の固有状態 $|\,\mu\,\rangle$

$$\Big(t + u_0 \Big) |\,\mu\,\rangle = \epsilon_\mu |\,\mu\,\rangle$$

を考える。$|\,\mu\,\rangle$ に対応する生成演算子を $c_\mu^\dagger$ とし

$$|\,\rangle = c_1^\dagger c_2^\dagger \cdots c_N^\dagger |0\rangle$$

とする。$|\,\mu\,\rangle$ が HF 方程式を満たさない場合でも

$$H = \sum_{\mu\mu'} \langle\, \mu\, | h_{\rm HF} |\, \mu'\,\rangle\, c_\mu^\dagger c_{\mu'} - \frac{1}{2} \sum_{hh'} \overline{v}_{hh'\, hh'} + V_{\rm res}\, , \qquad V_{\rm res} = \frac{1}{4} \sum_{\mu\nu\mu'\nu'} \overline{v}_{\mu\nu\, \mu'\nu'} : c_\mu^\dagger c_\nu^\dagger c_{\nu'} c_{\mu'} :$$

である。$\varDelta u = u_{\rm HF} - u_0$ とすると $h_{\rm HF} = t + u_0 + \varDelta u$ であるから

$$H = \sum_\alpha \epsilon_\mu\, c_\mu^\dagger c_\mu - \frac{1}{2} \sum_{hh'} \overline{v}_{hh'\, hh'} + H'\, , \qquad H' = \sum_{\mu\mu'} \langle\, \mu\, | \varDelta u |\, \mu'\,\rangle\, c_\mu^\dagger c_{\mu'} + V_{\rm res}$$

H' が摂動項になる。

$$H'|\ \rangle = \sum_{ph}\langle p|\varDelta u|h\rangle\, c_p^\dagger c_h|\ \rangle + V_{\rm res}|\ \rangle\,, \qquad |\ \rangle = c_1^\dagger c_2^\dagger\cdots c_N^\dagger|0\rangle$$

であるから $\varDelta u \neq 0$ ならば $|\tilde{\ }\rangle$ には 1 粒子・1 空孔状態が混ざる。

2.7 密度行列

多体系の状態 $|\Psi\rangle$ に対して

$$\rho_{\mu\nu} = \langle\mu|\hat\rho|\nu\rangle \equiv \langle\Psi|\, c_\nu^\dagger c_\mu\,|\Psi\rangle$$

を密度行列 (density matrix) という。ここで $|\mu\rangle$, $|\nu\rangle$ は適当な 1 粒子状態の完全系, $c^\dagger$ は対応する生成演算子である。一体演算子

$$F = \sum_{\mu\nu} f_{\mu\nu}\, c_\mu^\dagger c_\nu$$

の期待値は

$$\langle\Psi|F|\Psi\rangle = \sum_{\mu\nu} f_{\mu\nu}\langle\Psi|c_\mu^\dagger c_\nu|\Psi\rangle = \sum_{\mu\nu} f_{\mu\nu}\rho_{\nu\mu} = {\rm Tr}(f\rho)$$

と表せる。Tr は行列の対角要素の和, トレースである。

$|\Psi\rangle$ として HF 基底状態 $|\ \rangle$ を考え

$$\langle\mu|\,\hat\rho\,|\nu\rangle = \langle\ |\, c_\nu^\dagger c_\mu\,|\ \rangle\,, \qquad |\ \rangle = a_1^\dagger a_2^\dagger\cdots a_N^\dagger\,|\,0\,\rangle$$

とする。前に述べたように, HF 基底系の 1 粒子状態を α, β で表し, 特に粒子状態は p, p' で, 空孔状態は h, h' で区別する。HF 基底系でない一般の基底系の状態は μ, ν で示す。

$$|\mu\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\mu\rangle$$

より

$$c_\mu^\dagger = \sum_\alpha\langle\alpha|\mu\rangle\, a_\alpha^\dagger$$

である。(2.3) を使うと

$$\langle\mu|\,\hat\rho\,|\nu\rangle = \sum_{\alpha\beta}\langle\alpha|\nu\rangle\langle\mu|\beta\rangle\langle\ |\, a_\alpha^\dagger a_\beta\,|\ \rangle = \sum_h\langle\mu|h\rangle\langle h|\nu\rangle$$

つまり

$$\hat\rho = \sum_h |h\rangle\langle h|$$

と書ける。

$$\hat\rho^2 = \sum_{hh'}|h\rangle\langle h|h'\rangle\langle h'| = \sum_{hh'}|h\rangle\,\delta_{hh'}\,\langle h'| = \hat\rho$$

を満たす。これは状態 $|\Psi\rangle$ が単一のスレーター行列式で表されるときだけ成り立つ。$\hat\rho$ の固有値は 0 か 1 である。実際

$$\hat\rho\,|\alpha\rangle = \sum_h |h\rangle\langle h|\alpha\rangle = \theta_\alpha\,|\alpha\rangle\,, \qquad \theta_\alpha = \begin{cases} 1\,, & \text{hole states} \\ 0\,, & \text{particle states}\end{cases}$$

であり, HF 基底系の 1 粒子状態は $\hat{\rho}$ の固有状態である。

ハミルトニアン H を $c^\dagger$, c で表わし, ウィックの定理を使うと

$$H = \sum_{pq} t_{\mu\nu}\, c_\mu^\dagger c_\nu + \sum_{\mu\nu\mu'\nu'} \overline{v}_{pq\,p'q'} \left(\frac{1}{4} : c_\mu^\dagger c_\nu^\dagger c_{\nu'} c_{\mu'} : + \langle\ | c_\nu^\dagger c_{\nu'} |\ \rangle : c_\mu^\dagger c_{\mu'} : + \frac{1}{2} \langle\ | c_\nu^\dagger c_{\nu'} |\ \rangle \langle\ | c_\mu^\dagger c_{\mu'} |\ \rangle \right)$$

である。したがって

$$E_{\mathrm{HF}} = \langle\ |H|\ \rangle = \sum_{pq} t_{\mu\nu}\, \langle\ | c_\mu^\dagger c_\nu |\ \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu\mu'\nu'} \overline{v}_{\mu\nu\,\mu'\nu'} \langle\ | c_\nu^\dagger c_{\nu'} |\ \rangle \langle\ | c_\mu^\dagger c_{\mu'} |\ \rangle$$

$$= \sum_{\mu\nu} t_{\mu\nu}\, \rho_{\nu\mu} + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu\mu'\nu'} \overline{v}_{\mu\nu\,\mu'\nu'}\, \rho_{\nu'\nu}\, \rho_{\mu'\mu} \tag{2.27}$$

$$= \mathrm{Tr}\,(\, t\, \rho\,) + \frac{1}{2} \mathrm{Tr}_1 \mathrm{Tr}_2\, (\, \overline{v}\, \rho(1)\, \rho(2)\,) \tag{2.28}$$

と書ける。第 2 項目の添字 1, 2 は粒子 1, 2 についてそれぞれトレースを取ることを意味する。この表示は 1 粒子状態の基底系に依らない。基底として HF 基底系を用いると $\rho_{\alpha\beta} = \theta_\alpha\, \delta_{\alpha\beta}$ から直ちに (2.4) が求まる。

HF 基底状態をエネルギー (2.28) を最小にする $\hat{\rho}$ を与える状態として定義する。$|\ \rangle$ を変分すれば $\hat{\rho}$ も変化する。そこで $\hat{\rho}$ が $\hat{\rho} = \hat{\rho}_0$ から $\hat{\rho} = \hat{\rho}_0 + \delta\hat{\rho}$ になったときの E_{HF} の変化量を求めよう。以下では, 1 粒子状態の基底系として $\hat{\rho}_0$ が対角的になる HF 基底系を用いる。まず, $\hat{\rho}_0 + \delta\hat{\rho}$ もスレーター行列式の密度行列であるから

$$(\hat{\rho}_0 + \delta\hat{\rho})^2 = \hat{\rho}_0 + \delta\hat{\rho}$$

である。$\delta\hat{\rho}$ の 1 次までとると

$$\delta\hat{\rho} = \hat{\rho}_0\, \delta\hat{\rho} + \delta\hat{\rho}\, \hat{\rho}_0\,, \quad i.e. \quad \delta\rho_{\alpha\beta} = \theta_\alpha\, \delta\rho_{\alpha\beta} + \delta\rho_{\alpha\beta}\, \theta_\beta = (\theta_\alpha + \theta_\beta)\, \delta\rho_{\alpha\beta} \tag{2.29}$$

$\delta\rho_{\alpha\beta} \neq 0$ であるためには $\theta_\alpha + \theta_\beta = 1$, つまり $\theta_\alpha = 1$, $\theta_\beta = 0$ または $\theta_\alpha = 0$, $\theta_\beta = 1$ であり, $\delta\hat{\rho}$ は粒子–空孔成分 $\delta\rho_{ph}$, $\delta\rho_{hp}$ 以外は 0 である。

$$\delta E = E_{\mathrm{HF}}\,[\,\hat{\rho}_0 + \delta\hat{\rho}\,] - E_{\mathrm{HF}}\,[\,\hat{\rho}_0\,] = \sum_{\alpha\beta} h[\hat{\rho}_0]_{\alpha\beta}\, \delta\rho_{\beta\alpha} + \cdots = \sum_{ph} \Big(h[\hat{\rho}_0]_{ph}\, \delta\rho_{hp} + h[\hat{\rho}_0]_{hp}\, \delta\rho_{ph} \Big) + \cdots$$

ただし

$$h[\hat{\rho}]_{\alpha\beta} \equiv \frac{\partial E_{\mathrm{HF}}}{\partial \rho_{\beta\alpha}} = t_{\alpha\beta} + \sum_{\alpha'\beta'} \overline{v}_{\alpha\alpha'\,\beta\beta'}\, \rho_{\beta'\alpha'}$$

であり, $\hat{\rho} = \hat{\rho}_0$ のとき $\rho_{\beta\alpha} = \theta_\alpha\, \delta_{\alpha\beta}$ であるから

$$h[\hat{\rho}_0]_{\alpha\beta} = t_{\alpha\beta} + \sum_h \overline{v}_{\alpha h\,\beta h} = \langle \alpha |\, h_{\mathrm{HF}}\, | \beta \rangle \tag{2.30}$$

任意の $\delta\rho_{hp}$, $\delta\rho_{ph}$ に対して $\delta E = 0$ であるためには, h_{HF} の粒子–空孔成分が

$$h_{ph} = \langle\, p \,|\, h_{\mathrm{HF}} \,|\, h \,\rangle = 0 \tag{2.31}$$

でなければならない。この条件は h_{HF} の粒子–粒子成分と空孔–空孔成分には何の条件も与えないから, これだけでは 1 粒子状態の基底系を一意的に決定できない。そこで, 上の条件を満たす特別な場合である

$$\langle \alpha |\, h_{\mathrm{HF}}\, | \beta \rangle = \epsilon_\alpha\, \delta_{\alpha\beta}$$

を要請する。これはハートリー・フォック方程式に他ならない。

ところで

$$\langle\alpha|[\,h_{\rm HF}\,,\,\hat\rho_0\,]|\beta\rangle = \langle\alpha|\,(h_{\rm HF}\,\hat\rho_0 - \hat\rho_0\,h_{\rm HF})\,|\beta\rangle = (\theta_\beta-\theta_\alpha)\,\langle\alpha|\,h_{\rm HF}\,|\beta\rangle$$

であるから, 条件 (2.31) が成り立てば任意の $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ に対して $\langle\alpha|[\,h_{\rm HF}\,,\,\hat\rho_0\,]|\beta\rangle = 0$ である。したがって, (2.31) は

$$[\,h_{\rm HF}\,,\,\hat\rho_0\,] = 0 \tag{2.32}$$

と同等である。

(2.30) において $E_{\rm HF}$ を微分するとき, 相互作用 v が $\hat\rho$ に依存しないことを暗黙に仮定したが, 密度行列による HF 方程式の導出は密度依存型相互作用の場合にも適用できる。$v=v[\hat\rho]$ の場合

$$h_{\alpha\beta} = \frac{\partial E_{\rm HF}}{\partial\rho_{\beta\alpha}} = t_{\alpha\beta} + \sum_h \overline{v}_{\alpha h\,\beta h} + \frac{1}{2}\sum_{hh'}\langle hh'|\frac{\partial\overline{v}}{\partial\rho_{\beta\alpha}}|hh'\rangle$$

であるから, これを $\langle\alpha|h_{\rm HF}|\beta\rangle$ とする $h_{\rm HF}$ を採用すればよい。

1 粒子状態の微小変化として以上の議論を扱おう。1 粒子状態 $|\alpha\rangle$ が微小変化して

$$|\alpha\rangle + \sum_{\beta\neq\alpha} d_{\alpha\beta}\,|\beta\rangle$$

になったとする。ここで $d_{\alpha\beta}$ は微小量である。これに対応する生成演算子は

$$c^\dagger_\alpha = a^\dagger_\alpha + \sum_{\beta\neq\alpha} d_{\alpha\beta}\,a^\dagger_\beta$$

であるから, スレーター行列式は d の 1 次まで考えると

$$\begin{aligned}|\Psi\rangle &= c^\dagger_1\cdots c^\dagger_N|\,0\,\rangle = a^\dagger_1\cdots a^\dagger_N|\,0\,\rangle + \sum_{\beta\neq1} d_{1\beta}\,a^\dagger_\beta a^\dagger_2\cdots a^\dagger_N|\,0\,\rangle + \sum_{\beta\neq2} d_{2\beta}\,a^\dagger_1 a^\dagger_\beta a^\dagger_3\cdots a^\dagger_N|\,0\,\rangle + \cdots \\ &= a^\dagger_1\cdots a^\dagger_N|\,0\,\rangle + \sum_{i=1}^N\sum_{\beta\neq i} d_{i\beta} a^\dagger_1\cdots a^\dagger_{i-1}a^\dagger_\beta a^\dagger_{i+1}\cdots a^\dagger_N|\,0\,\rangle\end{aligned}$$

になる。$\beta = 1,\,2,\,\cdots,i-1,i+1,\cdots,N$ の場合

$$a^\dagger_1\cdots a^\dagger_{i-1}a^\dagger_\beta a^\dagger_{i+1}\cdots a^\dagger_N$$

は $(a^\dagger_\beta)^2$ を含むから寄与しない。したがって β は粒子状態について和をとればよい。また $a_i|\,0\,\rangle = 0$ より

$$a_i a^\dagger_i a^\dagger_{i+1}\cdots a^\dagger_N|\,0\,\rangle = \Big(1 - a^\dagger_i a_i\Big)\,a^\dagger_{i+1}\cdots a^\dagger_N|\,0\,\rangle = a^\dagger_{i+1}\cdots a^\dagger_N|\,0\,\rangle$$

であるから

$$a^\dagger_1\cdots a^\dagger_{i-1}a^\dagger_\beta a^\dagger_{i+1}\cdots a^\dagger_N|\,0\,\rangle = a^\dagger_1\cdots a^\dagger_{i-1}a^\dagger_\beta\,a_i\,a^\dagger_i a^\dagger_{i+1}\cdots a^\dagger_N|\,0\,\rangle$$

$k\neq i$ のとき $a^\dagger_k$ と $a^\dagger_\beta\,a_i$ は交換するから

$$a^\dagger_1\cdots a^\dagger_{i-1}a^\dagger_\beta a^\dagger_{i+1}\cdots a^\dagger_N|\,0\,\rangle = a^\dagger_\beta a_i\,a^\dagger_1\cdots a^\dagger_N|\,0\,\rangle$$

である。β は粒子状態, i は空孔状態であるから, それぞれ p, h と書き換えると

$$|\Psi\rangle = |\,\rangle + \sum_{ph} d_{hp}\,a^\dagger_p a_h|\,\rangle\,, \qquad |\,\rangle = a^\dagger_1\cdots a^\dagger_N|\,0\,\rangle$$

になる。エネルギー期待値は

$$\langle\Psi|H|\Psi\rangle = \langle\ |H|\ \rangle + \sum_{ph} d_{hp}\,\langle\ |Ha_p^\dagger a_h|\ \rangle + \sum_{ph} d_{hp}^*\,\langle\ |a_h^\dagger a_p H|\ \rangle$$

任意の微小変化 d_{hp} に対してエネルギー期待値が停留値になるためには

$$\langle\ |a_h^\dagger a_p H|\ \rangle = 0$$

である。この条件は (2.31) に他ならない。

問 2.3　(2.2) の H を $\langle\ |a_h^\dagger a_p H|\ \rangle$ に代入すると

$$\langle\ |a_h^\dagger a_p H|\ \rangle = \sum_{\alpha\alpha'} t_{\alpha\alpha'}\langle\ |a_h^\dagger a_p a_\alpha^\dagger a_{\alpha'}|\ \rangle + \frac{1}{4}\sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \overline{v}_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'}\langle\ |a_h^\dagger a_p a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'}|\ \rangle$$

である。$\langle\ |a_h^\dagger a_p a_\alpha^\dagger a_{\alpha'}|\ \rangle$ 及び $\langle\ |a_h^\dagger a_p a_\alpha^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'}|\ \rangle$ をウィックの定理を適用して求め

$$\langle\ |a_h^\dagger a_p H|\ \rangle = t_{ph} + \sum_{h'} \overline{v}_{ph'\,hh'} = \langle\, p\,|\, h_{\rm HF}\,|\, h\,\rangle$$

を示せ。

2.8　ハートリー・フォック方程式が正確に解ける模型

ハートリー・フォック方程式が解析的に解ける模型を扱う。N 重に縮退した 1 粒子状態が 2 種類ある系を考える。それぞれの 1 粒子エネルギーを $\pm\varepsilon/2$ とし, 1 粒子状態の生成演算子を $c_{\pm\,m}^\dagger$, ($m=1,\,2,\,\cdots,\,N$) で表す。ハミルトニアン H_0 は

$$H_0 = \varepsilon K_0\,,\qquad K_0 = \frac{1}{2}\sum_{m=1}^{N}\Big(c_{+m}^\dagger c_{+m} - c_{-m}^\dagger c_{-m}\Big)$$

である。縮退度と同じ粒子数の系だけを扱うことにする。この系に次の相互作用

$$H_{\rm int} = -\frac{V}{2}\Big(K_+K_+ + K_-K_-\Big)\,,\qquad K_+ = \sum_{m=1}^{N} c_{+m}^\dagger c_{-m}\,,\quad K_- = K_+^\dagger = \sum_{m=1}^{N} c_{-m}^\dagger c_{+m}$$

が作用した場合, ハートリー・フォック近似を行う。$K_\pm$ は 1 粒子状態 $|+m\,\rangle$ と $|-m\,\rangle$ だけを結びつけるから, HF1 粒子状態はこの 2 つの線形結合であるとして, 生成演算子を

$$a_{0m}^\dagger = D_{-0}\,c_{-m}^\dagger + D_{+0}\,c_{+m}^\dagger\,,\qquad a_{1m}^\dagger = D_{-1}\,c_{-m}^\dagger + D_{+1}\,c_{+m}^\dagger \tag{2.33}$$

とする。$|\,0m\,\rangle$ が $|\,1m\,\rangle$ よりエネルギーが低い状態とすれば, HF 基底状態 $|\ \rangle$ は

$$|\ \rangle = \prod_{m=1}^{N} a_{0m}^\dagger|\,0\,\rangle$$

である。$a^\dagger$, a の反交換関係から

$$\{\,a_{0m}^\dagger\,,\,a_{0m}\,\} = |D_{-0}|^2 + |D_{+0}|^2 = 1 \tag{2.34}$$

$$\{\,a_{1m}^\dagger\,,\,a_{1m}\,\} = |D_{-1}|^2 + |D_{+1}|^2 = 1 \tag{2.35}$$

$$\{\,a_{0m}^\dagger\,,\,a_{1m}\,\} = D_{-0}D_{-1}^* + D_{+0}D_{+1}^* = 0 \tag{2.36}$$

$D_{-1}^* = -\,D_{+0}D_{+1}^*/D_{-0}$ を (2.35) に代入すると

$$\left(\frac{|D_{+0}|^2}{|D_{-0}|^2}+1\right)|D_{+1}|^2 = 1\,, \qquad \text{これから} \quad |D_{+1}| = |D_{-0}|\,, \qquad |D_{-1}| = |D_{+0}|$$

である。(2.33) を $c^\dagger_{-m}$, $c^\dagger_{+m}$ について解くと

$$c^\dagger_{-m} = \kappa\left(D_{+1}\,a^\dagger_{0m} - D_{+0}\,a^\dagger_{1m}\right)\,, \qquad c^\dagger_{+m} = \kappa\left(D_{-0}\,a^\dagger_{1m} - D_{-1}\,a^\dagger_{0m}\right) \tag{2.37}$$

ただし

$$\kappa = \frac{1}{D_{+1}D_{-0} - D_{+0}D_{-1}}\,, \qquad |\kappa| = 1$$

(2.34), (2.35), (2.36) を使えば $|\kappa|^{-2} = 1$ を示せる。

HF 方程式　　$a_{1m}|\ \rangle = 0\,,\ a^\dagger_{0m}|\ \rangle = 0$ 及び (2.37) より

$$\langle\ |c^\dagger_{+m}c_{+m}|\ \rangle = |\kappa|^2|D_{-1}|^2\langle\ |a^\dagger_{0m}a_{0m}|\ \rangle = |D_{+0}|^2\,, \qquad \langle\ |c^\dagger_{-m}c_{-m}|\ \rangle = |D_{+1}|^2 = |D_{-0}|^2$$

であるから

$$\langle\ |K_0|\ \rangle = \sum_m \frac{|D_{+0}|^2 - |D_{-0}|^2}{2} = \frac{|D_{+0}|^2 - |D_{-0}|^2}{2}N$$

次に, Wick の定理を使うと

$$\begin{aligned}\langle\ |K_+K_+|\ \rangle &= \sum_{mm'}\langle\ |c^\dagger_{+m}c_{-m}c^\dagger_{+m'}c_{-m'}|\ \rangle \\ &= \sum_{mm'}\Big(\langle\ |c^\dagger_{+m}c_{-m}|\ \rangle\langle\ |c^\dagger_{+m'}c_{-m'}|\ \rangle - \langle\ |c^\dagger_{+m}c_{-m'}|\ \rangle\langle\ |c^\dagger_{+m'}c_{-m}|\ \rangle\Big)\end{aligned}$$

(2.37) より

$$\langle\ |c^\dagger_{+m}c_{-m'}|\ \rangle = -\,D_{-1}D^*_{+1}\delta_{mm'} = q^*\delta_{mm'}\,, \qquad q \equiv -\,D^*_{-1}D_{+1} \tag{2.38}$$

であるから

$$\langle\ |K_+K_+|\ \rangle = (q^*)^2\left(N^2 - N\right)\,, \qquad \langle\ |K_-K_-|\ \rangle = q^2\left(N^2 - N\right)$$

したがって

$$E_{\rm HF} = \langle\ |H|\ \rangle = \frac{\varepsilon N}{2}\left(|D_{+0}|^2 - |D_{-0}|^2\right) - \frac{V}{2}\left(N^2 - N\right)\left(q^{*\,2} + q^2\right)$$

(2.36) に D_{+1} をかけ $|D_{+1}|^2 = |D_{-0}|^2$ を使うと

$$q = D^*_{-0}D_{+0}$$

になる。これを $E_{\rm HF}$ に代入すると $E_{\rm HF}$ は $D_{\pm0}$ だけで表せる。

$|D_{-0}|^2 + |D_{+0}|^2 = 1$ の束縛条件を考慮して

$$E' = E_{\rm HF} - \lambda N\Big(|D_{-0}|^2 + |D_{+0}|^2\Big)$$

の変分を考える。D と D^* は独立と見なして D^* で微分すると

$$\frac{\partial E'}{\partial D^*_{-0}} = -\,\frac{\varepsilon N}{2}D_{-0} - V\left(N^2 - N\right)qD_{+0} - \lambda N D_{-0} = 0$$

$$\frac{\partial E'}{\partial D^*_{+0}} = \frac{\varepsilon N}{2}D_{+0} - V\left(N^2 - N\right)q^*D_{-0} - \lambda N D_{+0} = 0$$

これから

$$M\begin{pmatrix} D_{-0} \\ D_{+0} \end{pmatrix} = \frac{\lambda}{\varepsilon}\begin{pmatrix} D_{-0} \\ D_{+0} \end{pmatrix}\,, \quad \text{ただし}\quad M = \begin{pmatrix} -1/2 & -\chi q \\ -\chi q^* & 1/2 \end{pmatrix}\,, \quad \chi = \frac{V}{\varepsilon}\,(N-1) \tag{2.39}$$

これに D^*_{-0} をかけ $|D_{-0}|^2 = |D_{+1}|^2\,,\, D^*_{-0}D_{+0} = -\,D_{+1}D^*_{-1}$ を使うと

$$M\begin{pmatrix} D^*_{+1} \\ -\,D^*_{-1} \end{pmatrix} = \frac{\lambda}{\varepsilon}\begin{pmatrix} D^*_{+1} \\ -\,D^*_{-1} \end{pmatrix}$$

複素共役をとり並べ替えれば

$$M\begin{pmatrix} D_{-1} \\ D_{+1} \end{pmatrix} = -\,\frac{\lambda}{\varepsilon}\begin{pmatrix} D_{-1} \\ D_{+1} \end{pmatrix}$$

$D_{\pm 0}$ が固有値 λ/ε である M の固有ベクトルならば, $D_{\pm 1}$ は 固有値 $-\lambda/\varepsilon$ の固有ベクトルになる。

$\det(M - \lambda/\varepsilon) = 0$ から固有値は

$$\lambda^2 = \varepsilon^2\left(\frac{1}{4} + \chi^2|q|^2\right)$$

また

$$D_{+0} = -\,\frac{\varepsilon\,\chi q^*}{\lambda - \varepsilon/2}\,D_{-0}$$

及び $|D_{-0}|^2 + |D_{+0}|^2 = 1$ より

$$|D_{-0}|^2 = \frac{(\lambda-\varepsilon/2)^2}{(\lambda-\varepsilon/2)^2 + \varepsilon^2\chi^2|q|^2} = \frac{(\lambda-\varepsilon/2)^2}{(\lambda-\varepsilon/2)^2 + \lambda^2 - \varepsilon^2/4} = \frac{\lambda-\varepsilon/2}{2\lambda}$$

q が与えられれば λ が決まり $D_{\pm 0}$ も求まるが, q は $q = D^*_{-0}D_{+0}$ であるから, q を与えるには $D_{\pm 0}$ が既知でなければならない。したがって, 自己無撞着に解く必要がある。iteration の n 回目の q の値を q_n とすると

$$q_{n+1} = D^*_{-0}D_{+0} = -\,\frac{\varepsilon\chi q_n^*}{\lambda_n - \varepsilon/2}|D_{-0}|^2 = -\,\frac{\varepsilon\chi q_n^*}{2\lambda_n}$$

$D_{\pm 0}$ はエネルギーの低い方の解であるから $\lambda_n = -\,\varepsilon\,\sqrt{\chi^2|q_n|^2 + 1/4}$ である。これから

$$q_{n+1} = \frac{\chi\,q_n^*}{\sqrt{1+4\chi^2|q_n|^2}} \tag{2.40}$$

になる。自己無撞着に解くとはこの漸化式の極限値 q を求めることである。極限値は

$$q = \frac{\chi\,q^*}{\sqrt{1+4\chi^2|q|^2}}$$

より

$$q^2 = \begin{cases} 0\,, & \text{任意の } \chi \\ q_\chi^2\,, & \chi \geq 1 \text{ の場合} \end{cases}\,, \quad \text{ただし}\quad q_\chi = \frac{\sqrt{\chi^2-1}}{2\chi} \tag{2.41}$$

である。$q = 0$ の場合

$$\lambda = -\,\frac{\epsilon}{2}\,, \quad D_{-0} = 1\,, \quad D_{+0} = 0$$

また, $q^2 = (\chi^2-1)/(4\chi^2)$ のとき

$$\lambda = -\,\frac{\epsilon\chi}{2}\,, \quad D_{-0} = \sqrt{\frac{\chi+1}{2\chi}}\,, \quad D_{+0} = \eta\sqrt{\frac{\chi-1}{2\chi}}\,, \quad \eta = \begin{cases} +1\,, & q > 0 \text{ のとき} \\ -1\,, & q < 0 \text{ のとき} \end{cases}$$

HF 解の安定性　(2.41) の q において

$$E_{\rm HF}=\frac{\varepsilon N}{2}\Big(|D_{+0}|^2-|D_{-0}|^2-\chi\left(q^{*\,2}+q^2\right)\Big)$$

は極値になるが極小とは限らない。$|q|^2=|D_{-0}|^2|D_{+0}|^2=|D_{-0}|^2\left(1-|D_{-0}|^2\right)$ より

$$|D_{-0}|^2=\frac{1\pm\sqrt{1-4|q|^2}}{2}$$

であるが, $q=0$ のとき $|D_{-0}|=1$ であるから

$$|D_{-0}|^2=\frac{1+\sqrt{1-4|q|^2}}{2}\,,\quad |D_{+0}|^2=\frac{1-\sqrt{1-4|q|^2}}{2}$$

したがって

$$E_{\rm HF}=-\frac{\varepsilon N}{2}\Big(\sqrt{1-4|q|^2}+\chi\left(q^{*\,2}+q^2\right)\Big) \tag{2.42}$$

これを導くとき HF 条件 (2.39) は用いていない。$\operatorname{Im}q=0$ の場合

$$\frac{dE_{\rm HF}}{dq}=2\varepsilon Nq\left(\frac{1}{\sqrt{1-4q^2}}-\chi\right)\,,\qquad \frac{d^2E_{\rm HF}}{dq^2}=2\varepsilon N\left(\frac{1}{\left(1-4q^2\right)^{3/2}}-\chi\right)$$

であるから (2.41) を満たす q で $E_{\rm HF}$ は極値になる。しかし

$$\left.\frac{d^2E_{\rm HF}}{dq^2}\right|_{q=0}=2\varepsilon N\left(1-\chi\right)$$

であるから $\chi>1$ のとき $q=0$ で $E_{\rm HF}$ は極大になる。一方 $q^2=(\chi^2-1)/(4\chi^2)$ では

$$\frac{d^2E_{\rm HF}}{dq^2}=2\varepsilon N\chi\left(\chi^2-1\right)$$

であるから $\chi>1$ の場合極小になる。

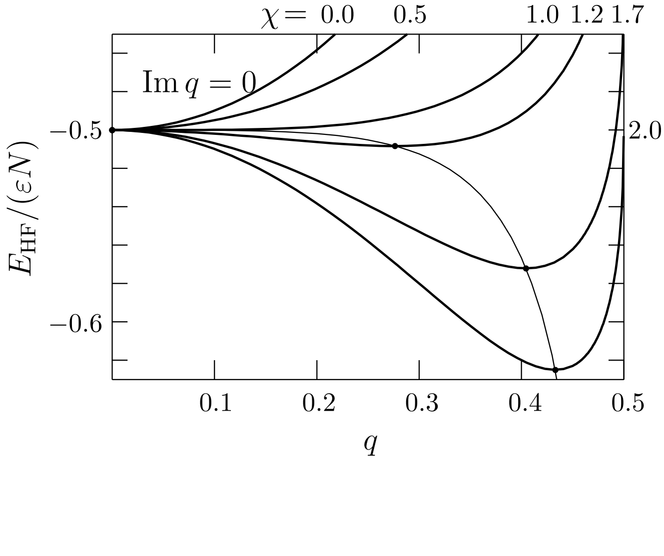
$\operatorname{Im}q=0$ の場合 $E_{\rm HF}$ を q の関数として図示すると下図のようになる。細い曲線は極点を結んだ曲線

$$f(q)=-\frac{\varepsilon N}{2}\frac{1-2q^2}{\sqrt{1-4q^2}}$$

である。$\operatorname{Re}q=0$ とすると

$$\frac{d^2E_{\rm HF}}{dq^2}=2\varepsilon N\left(\frac{1}{\left(1-4q^2\right)^{3/2}}+\chi\right)$$

$|\chi|>1$ のとき $q=0$ では $d^2E_{\rm HF}/dq^2>0$ になり極小であるから $q=0$ は鞍部点である。



HF 解の収束性　適当な q_0 を与えて漸化式 (2.40) を解くと (2.41) に収束するとは限らない。$q_n = r_n e^{i\theta_n}$ とすると (2.40) より

$$r_{n+1} = \frac{\chi}{\sqrt{1+4\chi^2 r_n^2}}\, r_n\,, \qquad \theta_{n+1} = -\,\theta_n = (-1)^{n+1}\theta_0$$

である。$a_n = 1/r_n^2$ で表すと

$$a_{n+1} = \frac{1}{\chi^2}\, a_n + 4\,, \quad \text{つまり} \quad a_{n+1} - \frac{4\chi^2}{\chi^2-1} = \frac{1}{\chi^2}\left(a_n - \frac{4\chi^2}{\chi^2-1}\right)$$

これから

$$a_n - \frac{1}{q_\chi^2} = \frac{1}{\chi^{2n}}\left(a_0 - \frac{1}{q_\chi^2}\right), \qquad q_\chi = \frac{\sqrt{\chi^2-1}}{2\chi}$$

したがって

$$r_n^2 = q_\chi^2 \frac{\chi^{2n}}{\chi^{2n} - 1 + q_\chi^2/r_0^2}$$

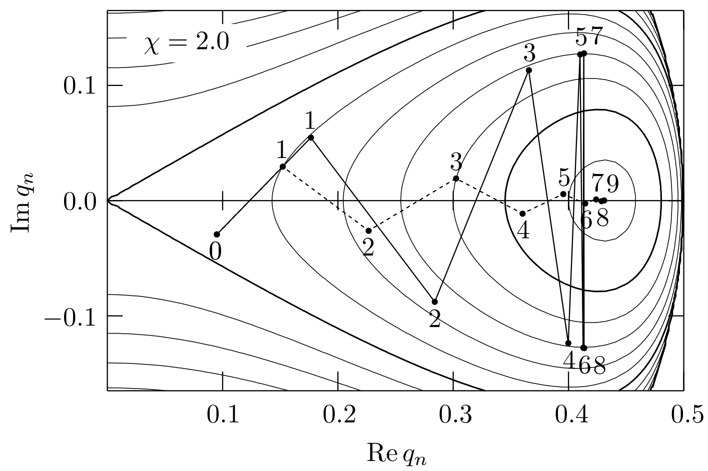
$n \longrightarrow \infty$ では

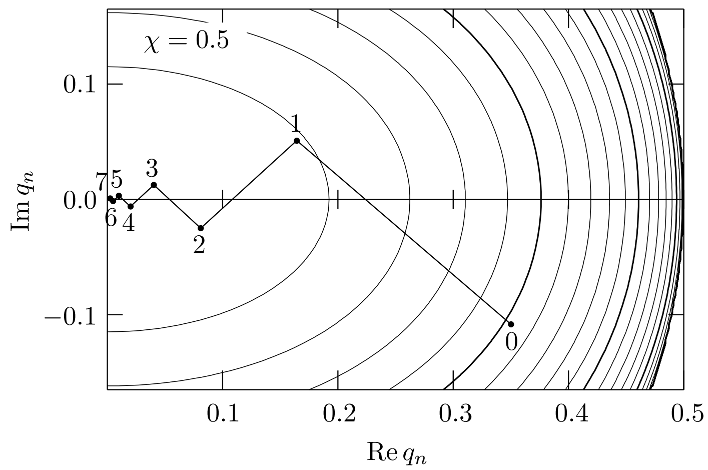
$$r_n^2 \longrightarrow \begin{cases} 0 \\ q_\chi^2 \end{cases}, \qquad q_n \longrightarrow \begin{cases} 0\,, & \chi^2 < 1 \\ q_\chi\, e^{(-1)^n i\theta_0}\,, & \chi^2 > 1 \end{cases}$$

$\chi > 1$ の場合, $\mathrm{Im}\, q_0 \neq 0$ として解くと, $|q_n|$ は (2.41) の極限値 q_χ に収束するが, q_n は $q_\chi\, e^{i\theta_0}$ と $q_\chi\, e^{-i\theta_0}$ の間を行き来し実軸上の点には収束しない。実軸上の点に収束させるには (2.40) の代わりに, 例えば

$$q_{n+1} = (1-a)\,\frac{\chi\, q_n^*}{\sqrt{1+4\chi^2|q_n|^2}} + a\, q_n\,, \qquad 0 \le a < 1 \tag{2.43}$$

を考える。この漸化式は (2.40) と同じ極限値に収束する。下図に漸化式 (2.40) の q_n を実線で, $a = 0.3$ とした (2.43) の q_n を破線で結び図示した。曲線は (2.42) の E_{HF} が一定になる等高線である。実線の振舞いは上の議論から理解できる。(2.43) の q_n は (2.41) の極限値に収束する。Hartree-Fock 方程式を数値計算で自己無撞着に解くとき, (2.43) と類似の処方は数値解の収束性を加速したり安定化するため用いることがある。





問 2.4　$H = H_0 + H_{\mathrm{int}}$ を $a^\dagger$, a の正規積に分解し, HF 方程式 (2.39) を求める。

1. (2.38) に注意して Wick の定理を適用すると

$$\begin{aligned} H_{\mathrm{int}} &= \frac{V}{2} \sum c^\dagger_{+m} c^\dagger_{+m'} c_{-m} c_{-m'} + (\,\mathrm{h.c.}\,) \\ &= :H_{\mathrm{int}}: + \frac{\varepsilon N}{2} \chi \left(q^2 + q^{*\,2} \right) - \varepsilon \chi \sum \left(q^* c^\dagger_{+m} c_{-m} + q\, c^\dagger_{-m} c_{+m} \right) \end{aligned}$$

   になることを示せ。ここで：　：は $a^\dagger$, a に関する正規積である。

2. 1. の結果から

$$H = H_0 + H_{\mathrm{int}} = H_{\mathrm{HF}} + :H_{\mathrm{int}}: + \frac{\varepsilon N}{2} \chi \left(q^2 + q^{*\,2} \right)$$

   とすると H_{HF} は

$$H_{\mathrm{HF}} = \varepsilon \sum_m (\, c^\dagger_{-m} \;\, c^\dagger_{+m} \,) M \begin{pmatrix} c_{-m} \\ c_{+m} \end{pmatrix}$$

   と表せることを示せ。ただし M は (2.39) で定義した行列である。

3. (2.37) は

$$(\, c^\dagger_{-m} \;\, c^\dagger_{+m} \,) = \kappa \,(\, a^\dagger_{0m} \;\, a^\dagger_{1m} \,)\, D\,, \qquad D = \begin{pmatrix} D_{+1} & -D_{-1} \\ -D_{+0} & D_{-0} \end{pmatrix}$$

   と表せる。$DD^\dagger = D^\dagger D = 1$ を示せ。上式を H_{HF} に代入すると

$$H_{\mathrm{HF}} = \varepsilon \sum_m (\, a^\dagger_{0m} \;\, a^\dagger_{1m} \,) DMD^\dagger \begin{pmatrix} a_{0m} \\ a_{1m} \end{pmatrix}$$

   である。$DMD^\dagger$ が対角化するように行列 D を決める。これから HF 方程式 (2.39) が成り立つことを示せ。

3 RPA

3.1 タム・ダンコフ方程式

多体系の励起状態を考える。基底状態をハートリー・フォックの基底状態とすると, 基本となる励起は空孔状態 $|\,h\,\rangle$ の粒子が粒子状態 $|\,p\,\rangle$ に遷移する励起である (パウリ原理のため粒子は他の空孔状態には遷移できない)。この励起状態は HF 基底状態に孔が一つあき粒子が一つ加わった状態であるから one–particle one–hole (1p1h) 状態という。一般には 2p2h, 3p3h, $\cdots$ が考えられるが, 低励起エネルギーの状態に限定すれば, 2p2h, 3p3h, $\cdots$ 励起は無視してもよかろう。そこで多体系の励起状態 $|\lambda\rangle$ を

$$|\lambda\rangle = \sum_{ph} X_{ph}\, a_p^\dagger a_h |\ \rangle \tag{3.1}$$

とし, $H\,|\lambda\rangle = E\,|\lambda\rangle$ となるように係数 X と固有値 E を決めたいわけだが, これは正確には成り立たない。そこで条件を弱めよう。(3.1) は, 状態空間を $a_p^\dagger a_h|\ \rangle$ に制限して, 励起状態 $|\lambda\rangle$ を展開したものである。したがって, この部分空間内で $H\,|\lambda\rangle = E\,|\lambda\rangle$ が成り立つことを要請する。つまり

$$\langle\ | a_h^\dagger a_p H|\lambda\rangle = E\langle\ | a_h^\dagger a_p|\lambda\rangle$$

である。(3.1) を代入し (2.20) の定数項 $E_{\rm HF}$ を右辺に移項すると

$$\sum_{p'h'}\langle\ | a_h^\dagger a_p\, H\, a_{p'}^\dagger a_{h'}\,|\ \rangle X_{p'h'} = \hbar\omega \sum_{p'h'}\langle\ | a_h^\dagger a_p a_{p'}^\dagger a_{h'}\,|\ \rangle X_{p'h'}\,, \qquad \hbar\omega = E - E_{\rm HF} \tag{3.2}$$

になる。ここで

$$H = H_0 + V_{\rm res}\,, \quad H_0 = \sum_\alpha \epsilon_\alpha : a_\alpha^\dagger a_\alpha :\,, \quad V_{\rm res} = \frac{1}{4}\sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \overline{v}_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'} : a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'} : \tag{3.3}$$

である。

簡単のため, HF 基底状態での期待値 $\langle\ |\cdots|\ \rangle$ を $\langle\cdots\rangle$ で表す。

$$\langle a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger\rangle = \langle a_\alpha a_\beta\rangle = 0 \ \ (\ \alpha,\, \beta \text{ は任意 }), \qquad \langle a_h^\dagger a_p\rangle = 0 \ \ (\ p \text{ は粒子, } h \text{ は空孔状態 })$$

であるからウィックの定理を使うと

$$\langle\, a_h^\dagger a_p a_{p'}^\dagger a_{h'}\,\rangle = \langle\, a_h^\dagger a_p a_{p'}^\dagger a_{h'}\rangle = \langle a_h^\dagger a_{h'}\rangle\,\langle a_p a_{p'}^\dagger\rangle = \delta_{hh'}\delta_{pp'}$$

正規積の真空期待値は 0 及び正規積中の演算子の縮約は寄与しないから

$$\begin{aligned}\langle\, a_h^\dagger a_p : a_\alpha^\dagger a_\alpha : a_{p'}^\dagger a_{h'}\,\rangle &= \langle\, a_h^\dagger a_p : a_\alpha^\dagger a_\alpha : a_{p'}^\dagger a_{h'}\,\rangle + \langle\, a_h^\dagger a_p : a_\alpha^\dagger a_\alpha : a_{p'}^\dagger a_{h'}\,\rangle \\ &= -\,\delta_{h\alpha}\,\delta_{pp'}\,\delta_{h'\alpha} + \delta_{hh'}\,\delta_{p\alpha}\,\delta_{p'\alpha} = \delta_{hh'}\delta_{pp'}\Big(\delta_{\alpha p} - \delta_{\alpha h}\Big)\end{aligned}$$

したがって

$$\langle\ | a_h^\dagger a_p\, H_0\, a_{p'}^\dagger a_{h'}\,|\ \rangle = \delta_{hh'}\delta_{pp'}\,\epsilon_{ph}\,, \qquad \epsilon_{ph} = \epsilon_p - \epsilon_h$$

同様にして

$$\begin{aligned}\langle\, a_h^\dagger a_p : a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'} : a_{p'}^\dagger a_{h'}\,\rangle &= \langle\, a_h^\dagger a_p : a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'} : a_{p'}^\dagger a_{h'}\,\rangle + \langle\, a_h^\dagger a_p : a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'} : a_{p'}^\dagger a_{h'}\,\rangle \\ &\quad + \langle\, a_h^\dagger a_p : a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'} : a_{p'}^\dagger a_{h'}\,\rangle + \langle\, a_h^\dagger a_p : a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'} : a_{p'}^\dagger a_{h'}\,\rangle \\ &= \Big(\delta_{\alpha p}\delta_{\beta h'} - \delta_{\alpha h'}\delta_{\beta p}\Big)\Big(\delta_{\alpha' h}\delta_{\beta' p'} - \delta_{\beta' h}\delta_{\alpha' p'}\Big)\end{aligned} \tag{3.4}$$

$\overline{v}$ の反対称性を考慮すると

$$\langle\,|\,a_h^\dagger a_p\,V_{\rm res}\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,|\,\rangle = \overline{v}_{ph'\,hp'}$$

したがって

$$A_{ph\,p'h'} = \langle\,|\,a_h^\dagger a_p\,H\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,|\,\rangle = \epsilon_{ph}\,\delta_{hh'}\delta_{pp'} + \overline{v}_{ph'\,hp'} \tag{3.5}$$

とすると (3.2) は

$$\sum_{p'h'} A_{ph\,p'h'} X_{p'h'} = \hbar\omega\,X_{ph} \tag{3.6}$$

になる。これを**タム・ダンコフ方程式** (Tamm–Dancoff equation) という。2 つの添字 ph を適当に並べて 1 列にすれば, タム・ダンコフ方程式は形式的に $AX = \hbar\omega\,X$ と書ける。これはエルミート行列 A の固有値問題である。また, タム・ダンコフで取り入れた残留相互作用 $\overline{v}_{ph'\,hp'}$ は $V_{\rm res}$ の分類 (2.21) において (2.24) の $V_{\rm ph}$ の部分だけである。

タム・ダンコフ方程式を摂動論的に考えてみる。X_{ph} と $\hbar\omega$ を v のベキ級数展開して

$$X_{ph} = X_{ph}^0 + X_{ph}^1 + \cdots\,, \qquad \omega = \omega^0 + \omega^1 + \cdots$$

としてタム・ダンコフ方程式に代入すると

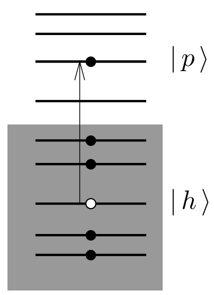
$$\epsilon_{ph}X_{ph}^0 + \epsilon_{ph}X_{ph}^1 + \cdots + \sum_{p'h'} \overline{v}_{ph'\,hp'}\left(X_{p'h'}^0 + X_{p'h'}^1 + \cdots\right) = \left(\hbar\omega^0 + \hbar\omega^1 + \cdots\right)\left(X_{ph}^0 + X_{ph}^1 + \cdots\right)$$

両辺の v の各ベキは等しいとすると

$$\epsilon_{ph}X_{ph}^0 = \hbar\omega^0\,X_{ph}^0\,, \qquad \epsilon_{ph}X_{ph}^1 + \sum_{p'h'} \overline{v}_{ph'\,hp'}X_{p'h'}^0 = \hbar\omega^0\,X_{ph}^1 + \hbar\omega^1\,X_{ph}^0$$

である。v の 0 次, つまり, $V_{\rm res}$ を無視すると, 最初の方程式から

$$\hbar\omega^0 = \epsilon_{ph}\,, \qquad X_{p'h'}^0 = \begin{cases} 1\,, & p' = p\,,\ h' = h \\ 0\,, & \text{その他} \end{cases}$$



になる。系の励起状態は純粋な粒子–空孔励起 $a_p^\dagger a_h|\,\rangle$ である。これを模式的に表せば図のようになる。残留相互作用を取り入れると, 系の励起状態は純粋な粒子–空孔励起ではなくなり, これらの重ね合わせになる。2 番目の方程式に $X_{p'h'}^0$ を代入すると

$$\epsilon_{p'h'}X_{p'h'}^1 + \overline{v}_{p'h\,h'p} = \epsilon_{ph}\,X_{p'h'}^1 + \hbar\omega^1\,X_{p'h'}^0$$

$p' = p$, $h' = h$ とすると $\hbar\omega^1 = \overline{v}_{ph\,hp} = \langle\,|\,a_h^\dagger a_p\,V_{\rm res}\,a_p^\dagger a_h\,|\,\rangle$ である。エネルギーに対する 1 次の補正は, 通常の摂動論から期待されるように, 摂動項 $V_{\rm res}$ の期待値である。$(p', h') \neq (p, h)$ のときは $X_{p'h'}^0 = 0$ であるから

$$X_{p'h'}^1 = \frac{\overline{v}_{p'h\,h'p}}{\epsilon_{ph} - \epsilon_{p'h'}} = \frac{1}{\epsilon_{ph} - \epsilon_{p'h'}}\langle\,|\,a_{h'}^\dagger a_{p'}\,V_{\rm res}\,a_p^\dagger a_h\,|\,\rangle$$

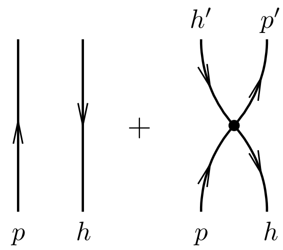
したがって, 1 次の摂動では

$$|\lambda\rangle \approx a_p^\dagger a_h|\,\rangle + \sum_{p'h'} a_{p'}^\dagger a_{h'}|\,\rangle \frac{1}{\epsilon_{ph} - \epsilon_{p'h'}}\langle\,|\,a_{h'}^\dagger a_{p'}\,V_{\rm res}\,a_p^\dagger a_h\,|\,\rangle$$

になる。

$$|\,ph^{-1}\,\rangle = a_p^\dagger a_h|\,\rangle\,,$$

とする。h が空孔であることを示す目印として -1 を付け, $|\,ph^{-1}\,\rangle$ が 2 粒子状態 $|\,ph\,\rangle$ ではないことを示す。



$$H_0|\,p'h'^{-1}\,\rangle = \epsilon_{p'h'}\,|\,p'h'^{-1}\,\rangle$$

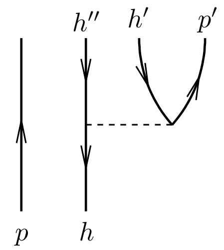
であるから

$$|\lambda\rangle \approx |\,ph^{-1}\,\rangle + \sum_{p'h'} |\,p'h'^{-1}\,\rangle\langle\,p'h'^{-1}\,|\,\frac{1}{\epsilon_{ph}-H_0}\,V_{\rm res}\,|\,ph^{-1}\,\rangle$$

これをダイヤグラムで表せば右図のようになる。

一般に 1 次の摂動論では

$$|\lambda\rangle \approx |\,ph^{-1}\,\rangle + \sum_{n} |\,n\,\rangle\langle\,n\,|\,\frac{1}{\epsilon_{ph}-H_0}\,V_{\rm res}\,|\,ph^{-1}\,\rangle$$



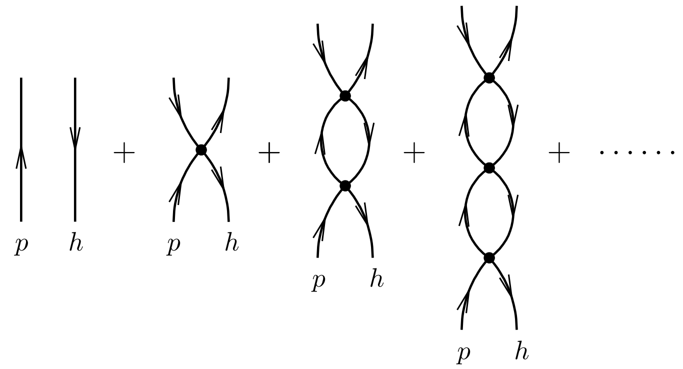
であり, $|\,n\,\rangle$ は 1p1h 状態に限らない。例えば, 右図のような 2p2h 状態も寄与する。これは $V_{\rm res}$ の分類 (2.21) において (2.26) の $V_{\rm Y}$ の寄与である。この状態のエネルギー分母 $\epsilon_{ph}-H_0$ は $\epsilon_{ph}-\epsilon_{ph''}-\epsilon_{p'h'}$ になるが, TDA では 1p1h 状態のエネルギー分母 $\epsilon_{ph}-\epsilon_{p'h'}$ に比べて

$$|\epsilon_{ph}-\epsilon_{ph''}-\epsilon_{p'h'}| \gg |\epsilon_{ph}-\epsilon_{p'h'}|$$

であると仮定して 1p1h 状態以外の寄与を無視する, つまり

$$\sum_n |\,n\,\rangle\langle\,n\,| \approx \sum_{p'h'} |\,p'h'^{-1}\,\rangle\langle\,p'h'^{-1}\,|$$

とする。ただし, この近似内で摂動項 $V_{\rm res}$ を無限次まで考慮する。TDA は非摂動論的近似である。ダイヤグラムで表せば次の図のようになる。



簡単な模型 相互作用の行列要素が一体のエルミート演算子 f を用いて

$$\overline{v}_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'} = \kappa\,f_{\alpha\alpha'}f_{\beta\beta'}\,, \qquad f_{\alpha\beta} = \langle\alpha|\,f\,|\beta\rangle \tag{3.7}$$

と分離できるとする。κ は結合定数である。

$$\sum_{p'h'} A_{ph\,p'h'}X_{p'h'} = \epsilon_{ph}X_{ph} + \kappa\,f_{ph}\sum_{p'h'} f^*_{p'h'}X_{p'h'} = \hbar\omega X_{ph}$$

であるから

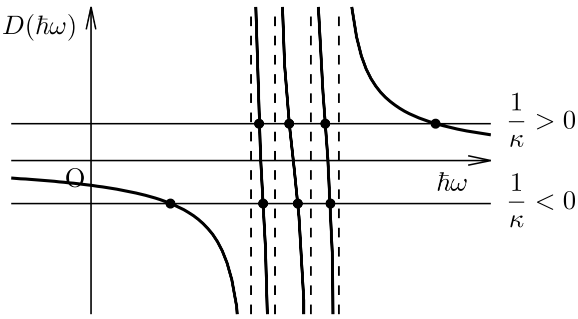
$$C \equiv \kappa \sum_{p'h'} f^*_{p'h'}\,X_{p'h'}$$

とすると (3.6) より

$$X_{ph} = C\,\frac{f_{ph}}{\hbar\omega-\epsilon_{ph}}$$

これを C の定義式に代入すると

$$D(\hbar\omega)=\sum_{ph}\frac{|f_{ph}|^2}{\hbar\omega-\epsilon_{ph}}=\frac{1}{\kappa} \tag{3.8}$$



であり, これから固有値 ω が求まる。これをグラフィカルに解くには, $D(\hbar\omega)$ を $\hbar\omega$ の関数として描き, この関数と直線 $y=1/\kappa$ の交点を求めればよい。その様子を右図に示す。

有限系では粒子–空孔 (ph) 励起エネルギー ϵ_{ph} は, 一様に分布せず局在化する傾向にある (殻構造)。閉殻の原子核では $\epsilon_{ph}\sim\hbar\omega_0, 2\hbar\omega_0,\cdots$ ($\hbar\omega_0\approx 41/A^{1/3}\,\mathrm{MeV}$) である。このような場合, ϵ_{ph} の間に挟まれた解と挟まれない解が得られる。挟まれた解 $\hbar\omega$ はある特定の ϵ_{ph} に非常に近いから, X_{ph} はこの成分のみが大きくなり近似的に

$$|\lambda\rangle\sim a_p^\dagger a_h|\ \rangle$$

である。これは相互作用により補正を受けた ph 状態である。挟まれない解は, 引力相互作用 $\kappa<0$ の場合には ϵ_{ph} よりも特に低いところに現れ, 斥力 $\kappa>0$ の場合は高いところに現れる。この励起状態は多数の ph 状態の重ね合わせになる。このような状態を**集団状態** (collective state) という。引力の強さが

$$\kappa\le\kappa_{\mathrm{TDA}}=\frac{1}{D(0)}=-\frac{1}{\displaystyle\sum_{ph}\frac{|f_{ph}|^2}{\epsilon_{ph}}} \tag{3.9}$$

では, 集団運動の励起エネルギーは負になる。これは引力が強すぎるため系が不安定になることを示している。

$F=\sum f_{\alpha\beta}a_\alpha^\dagger a_\beta$ の遷移行列要素は

$$\langle\lambda|F|\ \rangle=\sum_{ph}\sum_{\alpha\beta}X_{ph}^*f_{\alpha\beta}\langle\ |a_h^\dagger a_p a_\alpha^\dagger a_\beta|\ \rangle=\sum_{ph}X_{ph}^*f_{ph}=C^*\sum_{ph}\frac{|f_{ph}|^2}{\hbar\omega-\epsilon_{ph}}=\frac{C^*}{\kappa}$$

で与えられる。C は規格化条件

$$\langle\lambda|\lambda\rangle=\sum_{php'h'}(X_{ph})^*X_{p'h'}\langle\ |a_h^\dagger a_p a_{p'}^\dagger a_{h'}|\ \rangle=\sum_{ph}\left|X_{ph}\right|^2=1$$

から

$$|C|^{-2}=\sum_{ph}\frac{|f_{ph}|^2}{(\hbar\omega-\epsilon_{ph})^2}=-\frac{dD(\hbar\omega)}{d\hbar\omega} \tag{3.10}$$

である。したがって

$$|\langle\lambda|F|\ \rangle|^2=\frac{|C|^2}{\kappa^2}=\left(\kappa^2\sum_{ph}\frac{|f_{ph}|^2}{(\hbar\omega-\epsilon_{ph})^2}\right)^{-1}=-\left(\kappa^2\frac{dD(\hbar\omega)}{d\,\hbar\omega}\right)^{-1}$$

図の交点における $D(\hbar\omega)$ の接線の傾きが 0 に近いほど遷移行列要素は大きい。これから集団状態への遷移は特に強いことが分かる。

粒子–空孔励起エネルギー ϵ_{ph} が局在化した極限として, すべて ϵ に縮退している場合, TDA 方程式の解は $\hbar\omega=\epsilon$ と集団状態の解

$$\hbar\omega=\epsilon+\kappa\sum_{ph}|f_{ph}|^2$$

になる。集団状態の遷移行列要素は

$$|\langle\lambda|F|\ \rangle|^2 = \left(\frac{\kappa^2}{(\hbar\omega-\epsilon)^2}\sum_{ph}|f_{ph}|^2\right)^{-1} = \sum_{ph}|f_{ph}|^2 = \sum_{ph}|\langle ph^{-1}|F|\ \rangle|^2$$

であり, 集団状態にすべての遷移行列要素の和が集中する。

3.2 RPA

タム・ダンコフ近似 (TDA) では, HF 近似で無視した残留相互作用を励起状態については一部取り入れた。しかし, HF 基底状態を採用しているから, 基底状態に対する残留相互作用の影響 (**基底状態相関**) は考慮していない。基底状態相関を取り入れて TDA を改善した **RPA**(random phase approximation, 乱雑位相近似) を導出する。

多体系のハミルトニアン H の正確な基底状態 $|\,\mathrm{gs}\,\rangle$ と固有状態 $|\lambda\rangle$

$$H\,|\,\mathrm{gs}\,\rangle = E_0\,|\,\mathrm{gs}\,\rangle\,, \qquad H\,|\lambda\rangle = E\,|\lambda\rangle \tag{3.11}$$

が分かっているとする。次の性質

$$|\lambda\rangle = O_\lambda^\dagger\,|\,\mathrm{gs}\,\rangle\,, \quad O_\lambda\,|\,\mathrm{gs}\,\rangle = 0$$

を満たす演算子 $O_\lambda^\dagger$, O_λ を定義できる。形式的には

$$O_\lambda^\dagger = |\lambda\rangle\langle\,\mathrm{gs}\,|$$

である。(3.11) は

$$[\,H\,,\,O_\lambda^\dagger\,]|\,\mathrm{gs}\,\rangle = (E-E_0)\,O_\lambda^\dagger\,|\,\mathrm{gs}\,\rangle = \hbar\omega\,O_\lambda^\dagger\,|\,\mathrm{gs}\,\rangle$$

と書き直せる。これに任意の状態 $\langle\,\mathrm{gs}\,|\,\delta O$ を作用すると

$$\langle\,\mathrm{gs}\,|\Big[\,\delta O\,,\,[H\,,\,O_\lambda^\dagger\,]\Big]\,|\,\mathrm{gs}\,\rangle = \hbar\omega\,\langle\,\mathrm{gs}\,|[\,\delta O\,,\,O_\lambda^\dagger\,]|\,\mathrm{gs}\,\rangle \tag{3.12}$$

ただし $\langle\,\mathrm{gs}\,|O_\lambda^\dagger = 0$, $\langle\,\mathrm{gs}\,|HO_\lambda^\dagger = E_0\,\langle\,\mathrm{gs}\,|O_\lambda^\dagger = 0$ を使った。シュレディンガー方程式 (3.11) を近似的に解く場合, (3.11) を直接扱うのではなく, それと同等な (3.12) から考えた方が見通しがよい。

TDA は基底状態を HF 真空 $|\ \rangle$ で近似し, $O^\dagger$ を ph 励起だけに限定する近似である。

$$O_\lambda^\dagger = \sum_{ph} X_{ph}\,a_p^\dagger a_h\,, \quad \delta O^\dagger = a_p^\dagger a_h \tag{3.13}$$

を (3.12) に代入すると

$$\sum_{p'h'}\langle\ |\Big[\,a_h^\dagger a_p\,,\,[H\,,\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,]\Big]\,|\ \rangle X_{p'h'} = \hbar\omega\sum_{p'h'}\langle\ |[\,a_h^\dagger a_p\,,\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,]|\ \rangle X_{p'h'} \tag{3.14}$$

である。定数は交換関係には寄与しないから, 上式の H は E_{HF} を除いた部分 (3.3) である。

$$a_h^\dagger a_p a_{p'}^\dagger a_{h'} = \delta_{pp'}a_h^\dagger a_{h'} - a_{p'}^\dagger a_h^\dagger a_{h'} a_p = \delta_{pp'}\delta_{hh'} - \delta_{pp'}a_{h'}a_h^\dagger - a_{p'}^\dagger a_h^\dagger a_{h'} a_p$$

$\langle\ |a_h = \langle\ |a_{p'}^\dagger = 0$ より

$$\langle\ |a_h^\dagger a_p a_{p'}^\dagger a_{h'} = \delta_{pp'}\delta_{hh'}\langle\ |$$

これから

$$\begin{aligned}\langle\,|\left[a_h^\dagger a_p\,,\,[H\,,\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,]\right]|\,\rangle &= \langle\,|\,a_h^\dagger a_p\,[H\,,\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,]|\,\rangle\\ &= \langle\,|\,a_h^\dagger a_p\,H\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,|\,\rangle - \langle\,|\,a_h^\dagger a_p a_{p'}^\dagger a_{h'}\,H\,|\,\rangle\\ &= \langle\,|\,a_h^\dagger a_p\,H\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,|\,\rangle - \delta_{pp'}\delta_{hh'}\langle\,|H|\,\rangle\end{aligned}$$

H は正規積のみ含むから $\langle\,|\,H\,|\,\rangle = 0$ である。したがって

$$\langle\,|\left[a_h^\dagger a_p\,,\,[H\,,\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,]\right]|\,\rangle = \langle\,|\,a_h^\dagger a_p\,H\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,|\,\rangle$$

は TDA で定義した (3.5) である。これと

$$\langle\,|[a_h^\dagger a_p\,,\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,]|\,\rangle = \delta_{hh'}\,\delta_{pp'}$$

より, (3.14) はタム・ダンコフ方程式 (3.6) になる。

(3.12) を使うと TDA を一般化することは容易である。真の基底状態 $|\,\mathrm{gs}\,\rangle$ は基底状態相関のため HF 真空とは異なろう。したがって, $a_h^\dagger a_p|\,\rangle = 0$ であるが $a_h^\dagger a_p|\,\mathrm{gs}\,\rangle \neq 0$ である。これから (3.13) を拡張して

$$O_\lambda^\dagger = \sum_{ph}\left(X_{ph}\,a_p^\dagger a_h - Y_{ph}\,a_h^\dagger a_p\right)\,,\quad \delta O^\dagger = a_p^\dagger a_h,\ a_h^\dagger a_p \tag{3.15}$$

とする。この近似を **RPA**(random phase approximation) という。RPA における真空 $|\,0\rangle$ は

$$O_\lambda|\,0\,\rangle = 0$$

で定義される。(3.12) は

$$\begin{aligned}\langle 0|\left[a_h^\dagger a_p\,,\,[H\,,\,O_\lambda^\dagger\,]\right]|\,0\,\rangle &= \hbar\omega\,\langle\,0\,|[\,a_h^\dagger a_p\,,\,O_\lambda^\dagger\,]|\,0\,\rangle\\ \langle 0|\left[a_p^\dagger a_h\,,\,[H\,,\,O_\lambda^\dagger\,]\right]|\,0\,\rangle &= \hbar\omega\,\langle\,0\,|[\,a_p^\dagger a_h\,,\,O_\lambda^\dagger\,]|\,0\,\rangle\end{aligned} \tag{3.16}$$

となる。RPA 真空は具体的にはまだ分からないから, RPA 真空での期待値を求めることはできない。そこで, RPA 真空は極端には HF 真空とは変わらないとして, 交換関係の RPA 真空期待値を HF 真空での期待値で近似する。例えば

$$\langle\,0\,|[\,a_h^\dagger a_p\,,\,a_{p'}^\dagger a_{h'}]|\,0\,\rangle \approx \langle\,|[\,a_h^\dagger a_p\,,\,a_{p'}^\dagger a_{h'}]|\,\rangle = \delta_{pp'}\,\delta_{hh'} \tag{3.17}$$

である。(3.16) で $|\,0\rangle$ を $|\,\rangle$ で置き換え (3.15) の $O_\lambda^\dagger$ を代入すると

$$\sum_{p'h'}\left(\langle\,|\left[a_h^\dagger a_p\,,\,[H\,,\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,]\right]|\,\rangle X_{p'h'} - \langle\,|\left[a_h^\dagger a_p\,,\,[H\,,\,a_{h'}^\dagger a_{p'}\,]\right]|\,\rangle Y_{p'h'}\right) = \hbar\omega X_{ph}$$

$$\sum_{p'h'}\left(\langle\,|\left[a_p^\dagger a_h\,,\,[H\,,\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,]\right]|\,\rangle X_{p'h'} - \langle\,|\left[a_p^\dagger a_h\,,\,[H\,,\,a_{h'}^\dagger a_{p'}\,]\right]|\,\rangle Y_{p'h'}\right) = \hbar\omega Y_{ph}$$

である。ここで

$$A_{ph\,p'h'} \equiv \langle\,|\left[a_h^\dagger a_p\,,\,[H\,,\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,]\right]|\,\rangle = \langle\,|\,a_h^\dagger a_p\,H\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,|\,\rangle \tag{3.18}$$

$$B_{ph\,p'h'} \equiv -\langle\,|\left[a_h^\dagger a_p\,,\,[H\,,\,a_{h'}^\dagger a_{p'}\,]\right]|\,\rangle = \langle\,|\,a_h^\dagger a_p a_{h'}^\dagger a_{p'} H\,|\,\rangle \tag{3.19}$$

とする。一般に演算子 P, Q に対して

$$[\,P\,,\,Q\,]^\dagger = [\,Q^\dagger\,,\,P^\dagger\,]$$

であるから

$$\begin{aligned} A^*_{ph\,p'h'} &= \langle\,|\Big[\,a^\dagger_h a_p\,,\,[H\,,\,a^\dagger_{p'}a_{h'}\,]\Big]^\dagger|\,\rangle = \langle\,|\Big[\,[\,a^\dagger_{h'}a_{p'}\,,\,H\,]\,,\,a^\dagger_p a_h\Big]\,|\,\rangle \\ &= \langle\,|\Big[\,a^\dagger_p a_h\,,\,[H\,,\,a^\dagger_{h'}a_{p'}\,]\Big]\,|\,\rangle \end{aligned}$$

同様にして

$$B^*_{ph\,p'h'} = -\langle\,|\Big[\,a^\dagger_p a_h\,,\,[H\,,\,a^\dagger_{p'}a_{h'}\,]\Big]\,|\,\rangle$$

である。したがって

$$\begin{aligned} &\sum_{p'h'}\big(A_{ph\,p'h'}X_{p'h'} + B_{ph\,p'h'}Y_{p'h'}\big) = \hbar\omega\,X_{ph} \\ &\sum_{p'h'}\big(B^*_{ph\,p'h'}X_{p'h'} + A^*_{ph\,p'h'}Y_{p'h'}\big) = -\,\hbar\omega\,Y_{ph} \end{aligned} \tag{3.20}$$

になる。(3.20) を **RPA 方程式** (RPA equation) という。この方程式は行列形式で表わすと

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \hbar\omega\begin{pmatrix} X \\ -\,Y \end{pmatrix} \tag{3.21}$$

と書ける。ここで A, B は正方行列, X, Y は列ベクトルである。

RPA 方程式に現れる A, B のうち

$$A_{ph\,p'h'} = \langle\,|\,a^\dagger_h a_p\,H\,a^\dagger_{p'}a_{h'}\,|\,\rangle = \epsilon_{ph}\,\delta_{hh'}\,\delta_{pp'} + \overline{v}_{ph'\,hp'} \tag{3.22}$$

は TDA で現れた (3.5) である。一方, $B_{ph\,p'h'}$ は TDA にはない項である。これを $\overline{v}$ で表す。

$$\langle\,|\,a^\dagger_h a_p a^\dagger_{h'}a_{p'}H_0|\,\rangle = \sum_\alpha \epsilon_\alpha\langle\,|\,a^\dagger_h a_p a^\dagger_{h'}a_{p'} : a^\dagger_\alpha a_\alpha : |\,\rangle = 0$$

であるから, B に寄与するのは $V_{\rm res}$ だけである。(3.4) と同様にすると

$$\begin{aligned} \langle\,a^\dagger_h a_p a^\dagger_{h'}a_{p'} : a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta a_{\beta'}a_{\alpha'} :\rangle &= \langle a^\dagger_h a_p a^\dagger_{h'}a_{p'} : a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta a_{\beta'}a_{\alpha'} :\rangle + \langle a^\dagger_h a_p a^\dagger_{h'}a_{p'} : a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta a_{\beta'}a_{\alpha'} :\rangle \\ &\quad + \langle a^\dagger_h a_p a^\dagger_{h'}a_{p'} : a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta a_{\beta'}a_{\alpha'} :\rangle + \langle a^\dagger_h a_p a^\dagger_{h'}a_{p'} : a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta a_{\beta'}a_{\alpha'} :\rangle \\ &= \Big(\delta_{\alpha p}\delta_{\beta p'} - \delta_{\alpha p'}\delta_{\beta p}\Big)\Big(\delta_{\alpha' h}\delta_{\beta' h'} - \delta_{\beta' h}\delta_{\alpha' h'}\Big) \end{aligned} \tag{3.23}$$

になるから

$$B_{ph\,p'h'} = \langle\,|\,a^\dagger_h a_p a^\dagger_{h'}a_{p'}V_{\rm res}\,|\,\rangle = \overline{v}_{pp'\,hh'} \tag{3.24}$$

である。$B_{ph\,p'h'}$ は $V_{\rm res}$ の分類 (2.21) において (2.25) の $V_{\rm V}$ の部分であり 2p–2h 状態を励起する。逆に $B^*_{ph\,p'h'}$ は

$$B^*_{ph\,p'h'} = \langle\,|\,a^\dagger_h a_p a^\dagger_{h'}a_{p'}V_{\rm res}\,|\,\rangle^* = \langle\,|V_{\rm res}a^\dagger_{p'}a_{h'}a^\dagger_p a_h|\,\rangle = \overline{v}^*_{pp'\,hh'} = \overline{v}_{hh'\,pp'}$$

2p–2h を消滅させる。2p–2h の生成・消滅を取り入れた効果は基底状態にも反映し, $O_\lambda|\,0\,\rangle = 0$ で定義される RPA 真空 $|\,0\,\rangle$ は

$$|\,0\,\rangle = |\,\rangle + |2\text{p–2h}\rangle + |4\text{p–4h}\rangle + \cdots$$

という重ね合わせになる。これが基底状態相関である。

展開係数 X_{ph}, Y_{ph} は $\langle 0|O_\lambda^\dagger = 0$ を使うと

$$\begin{aligned}\langle 0|a_h^\dagger a_p|\lambda\rangle &= \langle 0|\left[a_h^\dagger a_p\,,\,O_\lambda^\dagger\right]|0\rangle \approx \langle\,|\left[a_h^\dagger a_p\,,\,O_\lambda^\dagger\right]|\,\rangle = X_{ph}\\ \langle 0|a_p^\dagger a_h|\lambda\rangle &= \langle 0|\left[a_p^\dagger a_h\,,\,O_\lambda^\dagger\right]|0\rangle \approx \langle\,|\left[a_p^\dagger a_h\,,\,O_\lambda^\dagger\right]|\,\rangle = Y_{ph}\end{aligned} \tag{3.25}$$

であるから X, Y は遷移密度行列 $\rho^\lambda_{\alpha\beta} = \langle 0|\,a_\beta^\dagger a_\alpha\,|\lambda\rangle$ の粒子–空孔成分である。なお, RPA では ρ^λ の粒子–粒子, 空孔–空孔要素は 0 である。

簡単な模型　TDA と同様に, 相互作用が (3.7) で与えられるとき, RPA 方程式 (3.20) は

$$\epsilon_{ph}X_{ph} + \kappa f_{ph}\sum_{p'h'}\left(f^*_{p'h'}X_{p'h'} + f_{p'h'}Y_{p'h'}\right) = \hbar\omega X_{ph}$$
$$\epsilon_{ph}Y_{ph} + \kappa f^*_{ph}\sum_{p'h'}\left(f^*_{p'h'}X_{p'h'} + f_{p'h'}Y_{p'h'}\right) = -\hbar\omega Y_{ph}$$

になる。

$$C = \kappa\sum_{p'h'}\left(f^*_{p'h'}X_{p'h'} + f_{p'h'}Y_{p'h'}\right) \tag{3.26}$$

とおくと

$$X_{ph} = \frac{Cf_{ph}}{\hbar\omega - \epsilon_{ph}}\,, \qquad Y_{ph} = -\frac{Cf^*_{ph}}{\hbar\omega + \epsilon_{ph}} \tag{3.27}$$

これを C の定義式に代入すると

$$D_{\rm RPA}(\hbar\omega) = \frac{1}{\kappa}\,, \qquad D_{\rm RPA}(x) = \sum_{ph}\frac{2\epsilon_{ph}\,|f_{ph}|^2}{x^2 - \epsilon_{ph}^2} \tag{3.28}$$

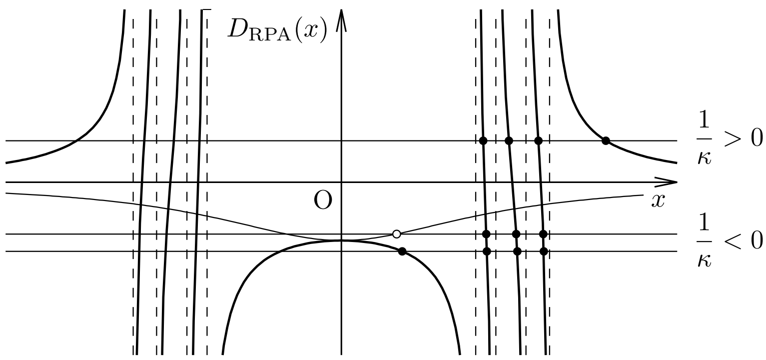
を得る。この方程式を図を用いて解くと次の図のようになる。$\hbar\omega$ を複素数として $\hbar\omega = x + iy$ とおくと

$$D_{\rm RPA}(x+iy) = \sum_{ph}\frac{2\epsilon_{ph}\,|f_{ph}|^2}{(x+iy)^2 - \epsilon_{ph}^2} = \sum_{ph}2\epsilon_{ph}\,|f_{ph}|^2\,\frac{x^2 - y^2 - \epsilon_{ph}^2 - 2ixy}{(x^2 - y^2 - \epsilon_{ph}^2)^2 + 4x^2y^2} = \frac{1}{\kappa}$$

になるから $xy = 0$ である。実数解 ($y = 0$) または純虚数解 ($x = 0$) が存在しうる。細い曲線は

$$D_{\rm RPA}(ix) = \sum_{ph}\frac{2\epsilon_{ph}\,|f_{ph}|^2}{-x^2 - \epsilon_{ph}^2}$$

である。この曲線との交点 (∘) は純虚数解 $(\hbar\omega)^2 = -x^2 < 0$ を表す。



TDA との大きな違いは, 引力が強いときの集団状態の励起エネルギーである。(3.9) で示したように, TDA では $\kappa < \kappa_{\mathrm{TDA}}$ のとき負の励起エネルギーが現れるが, RPA では

$$\kappa < \kappa_{\mathrm{RPA}} = \frac{1}{D_{\mathrm{RPA}}(0)} = -\frac{1}{2\sum_{ph} \dfrac{|f_{ph}|^2}{\epsilon_{ph}}} = \frac{\kappa_{\mathrm{TDA}}}{2} \tag{3.29}$$

になると, 集団状態の励起エネルギーは実数ではなく純虚数になる。これも引力に対する HF 基底状態の不安定性を表す。

粒子–空孔エネルギー ϵ_{ph} が ϵ に縮退している場合, (3.28) の解は

$$(\hbar\omega_\lambda)^2 = \epsilon^2 \left(1 + 2\frac{\kappa}{\epsilon} \sum_{ph} |f_{ph}|^2 \right)$$

となる。残留相互作用が弱くて

$$\left| \kappa \sum_{ph} |f_{ph}|^2 \right| \ll \epsilon$$

のとき

$$\hbar\omega_\lambda \approx \epsilon + \kappa \sum_{ph} |f_{ph}|^2$$

で近似でき TDA の結果に一致する。一方, 引力が強くなると $\omega_\lambda^2 < 0$ であり, 前に述べたように ω_λ は純虚数になる。

3.3 プラズマ振動

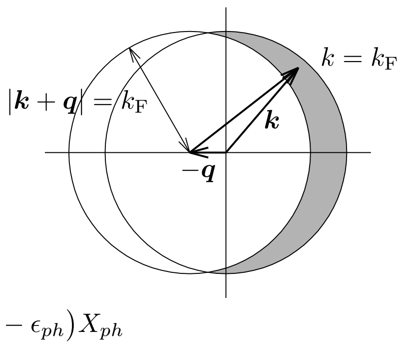
正負の電荷が等量存在し全体としては電気的に中性である電離気体をプラズマというが, プラズマ中での電子の振動運動を RPA で扱う。一様な陽電荷を背景とする電子ガスでは, 系全体として電気的に中性のとき, 電子が一様に分布している状態が基底状態になると考えられるから, 電子の 1 粒子状態は平面波 (2.9)

$$\psi_{\boldsymbol{k}\,\sigma}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\, \chi_\sigma\,, \qquad \chi_\sigma^\dagger \chi_{\sigma'} = \delta_{\sigma\sigma'}\,, \qquad \sigma,\, \sigma' = \pm 1/2$$

である。フェルミ波数を k_{F} として, 基底状態では電子は $|\boldsymbol{k}| \le k_{\mathrm{F}}$ の状態まで占めているとする。

(3.15) では全ての可能な粒子空孔の和になっているが, 実際の問題を解く場合, 励起状態がハミルトニアンと交換する物理量 (運動量や角運動量など) の固有状態になるように和に制限をつける。どのような物理量を採用するかは相互作用と扱う系に依存する。無限に広がった系では運動量はよい量子数であるから, 運動量 $\boldsymbol{q}$ の励起状態を考え

$$O^\dagger = \sum_{\boldsymbol{k}\,\sigma}{}^{+} X_{\boldsymbol{k},\sigma}\, a_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}^\dagger a_{\boldsymbol{k},\sigma} - \sum_{\boldsymbol{k}\,\sigma}{}^{-} Y_{\boldsymbol{k},\sigma}\, a_{\boldsymbol{k},\sigma}^\dagger a_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\sigma} \tag{3.30}$$



とする。ここで, $\sum^{\pm}$ は $|\boldsymbol{k}| \le k_{\mathrm{F}}$, $|\boldsymbol{k}{\pm}\boldsymbol{q}| > k_{\mathrm{F}}$ である $\boldsymbol{k}$ について和をとる。右図に $\sum^{+}$ の領域を示す。第 1 項目では, 運動量 $\boldsymbol{k}$ の状態を消し $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}$ を生成するから, 結局 $(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) - \boldsymbol{k} = \boldsymbol{q}$ の状態になる。第 2 項目についても同様である。(3.20)

$$\sum_{p'h'} \overline{v}_{ph'\,hp'} X_{p'h'} + \sum_{p'h'} \overline{v}_{pp'\,hh'} Y_{p'h'} = \big(\hbar\omega - \epsilon_{ph}\big) X_{ph}$$

$$\sum_{p'h'} \overline{v}^*_{pp'\,hh'} X_{p'h'} + \sum_{p'h'} \overline{v}^*_{ph'\,hp'} Y_{p'h'} = -\big(\hbar\omega + \epsilon_{ph}\big) Y_{ph}$$

において $h \to \boldsymbol{k}\sigma$, X の $p \to \boldsymbol{k}{+}\boldsymbol{q}\,\sigma$, Y の $p \to \boldsymbol{k}{-}\boldsymbol{q}\,\sigma$ 等の置き換えをすれば

$$\sum_{\boldsymbol{k}'\sigma'}^{+} C_{\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma'}(\boldsymbol{q}) X_{\boldsymbol{k}'\sigma'} + \sum_{\boldsymbol{k}'\sigma'}^{-} B_{\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma'}(\boldsymbol{q}) Y_{\boldsymbol{k}'\sigma'} = \Big(\hbar\omega - E_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} + E_{\boldsymbol{k}}\Big) X_{\boldsymbol{k}\sigma} \tag{3.31}$$

$$\sum_{\boldsymbol{k}'\sigma'}^{+} B^{*}_{\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma'}(-\boldsymbol{q})\, X_{\boldsymbol{k}'\sigma'} + \sum_{\boldsymbol{k}'\sigma'}^{-} C^{*}_{\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma'}(-\boldsymbol{q})\, Y_{\boldsymbol{k}'\sigma'} = -\Big(\hbar\omega + E_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} - E_{\boldsymbol{k}}\Big) Y_{\boldsymbol{k}\sigma} \tag{3.32}$$

になる。ただし, m を電子の質量として $E_{\boldsymbol{k}} = \hbar^2 \boldsymbol{k}^2/(2m)$

$$C_{\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma'}(\boldsymbol{q}) = \langle\, \boldsymbol{k}{+}\boldsymbol{q}\,\sigma\,,\, \boldsymbol{k}'\sigma' \,|\, \overline{v} \,|\, \boldsymbol{k}\,\sigma\,,\, \boldsymbol{k}'{+}\boldsymbol{q}\,\sigma' \rangle$$

$$B_{\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma'}(\boldsymbol{q}) = \langle\, \boldsymbol{k}{+}\boldsymbol{q}\,\sigma\,,\, \boldsymbol{k}'{-}\boldsymbol{q}\,\sigma' \,|\, \overline{v} \,|\, \boldsymbol{k}\,\sigma\,,\, \boldsymbol{k}'\,\sigma' \rangle$$

である。$\overline{v}$ は電子間のクーロン力

$$v(1,2) = \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|}$$

を反対称化した行列要素を表す。一般に

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{k}_1\sigma_1\,,\, \boldsymbol{k}_2\sigma_2 |\, v\, | \boldsymbol{k}_1'\sigma_1'\,,\, \boldsymbol{k}_2'\sigma_2' \rangle &= \delta_{\sigma_1\sigma_1'}\delta_{\sigma_2\sigma_2'} \frac{e^2}{V^2} \int d^3r_1\, d^3r_2\, \frac{\exp\Big(i(\boldsymbol{k}_1' - \boldsymbol{k}_1)\cdot\boldsymbol{r}_1 + i(\boldsymbol{k}_2' - \boldsymbol{k}_2)\cdot\boldsymbol{r}_2\Big)}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} \\
&= \delta_{\sigma_1\sigma_1'}\delta_{\sigma_2\sigma_2'} \frac{e^2}{V^2} \int d^3r_2\, \exp\Big(i(\boldsymbol{k}_1' - \boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{k}_2' - \boldsymbol{k}_2)\cdot\boldsymbol{r}_2\Big) \\
&\quad \times \int d^3r\, \frac{\exp\Big(i(\boldsymbol{k}_1' - \boldsymbol{k}_1)\cdot\boldsymbol{r}\Big)}{r} \\
&= \delta_{\sigma_1\sigma_1'}\delta_{\sigma_2\sigma_2'}\delta_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2\,,\,\boldsymbol{k}_1'+\boldsymbol{k}_2'} \frac{e^2}{V}\, \frac{1}{|\boldsymbol{k}_1 - \boldsymbol{k}_1'|^2}
\end{aligned}$$

ただし, (2.13) を使った。したがって

$$\begin{aligned}
C_{\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma'}(\boldsymbol{q}) &= \langle\, \boldsymbol{k}{+}\boldsymbol{q}\,\sigma\,,\, \boldsymbol{k}'\sigma' \,|\, v \,|\, \boldsymbol{k}\,\sigma\,,\, \boldsymbol{k}'{+}\boldsymbol{q}\,\sigma' \rangle - \langle\, \boldsymbol{k}{+}\boldsymbol{q}\,\sigma\,,\, \boldsymbol{k}'\sigma' \,|\, v \,|\, \boldsymbol{k}'{+}\boldsymbol{q}\,\sigma'\,,\, \boldsymbol{k}\,\sigma\, \rangle \\
&= \frac{4\pi e^2}{V} \left(\frac{1}{|\boldsymbol{q}|^2} - \frac{\delta_{\sigma\sigma'}}{|\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'|^2} \right) \\
B_{\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma'}(\boldsymbol{q}) &= \langle\, \boldsymbol{k}{+}\boldsymbol{q}\,\sigma\,,\, \boldsymbol{k}'{-}\boldsymbol{q}\,\sigma' \,|\, v \,|\, \boldsymbol{k}\,\sigma\,,\, \boldsymbol{k}'\,\sigma' \rangle - \langle\, \boldsymbol{k}{+}\boldsymbol{q}\,\sigma\,,\, \boldsymbol{k}'{-}\boldsymbol{q}\,\sigma' \,|\, v \,|\, \boldsymbol{k}'\,\sigma',\, \boldsymbol{k}\,\sigma \rangle \\
&= \frac{4\pi e^2}{V} \left(\frac{1}{|\boldsymbol{q}|^2} - \frac{\delta_{\sigma\sigma'}}{|\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}' + \boldsymbol{q}|^2} \right)
\end{aligned}$$

になる。$q = |\boldsymbol{q}|$ が小さいとき $|\boldsymbol{k}| \le k_{\mathrm{F}}$, $|\boldsymbol{k} \pm \boldsymbol{q}| > k_{\mathrm{F}}$ を満たす $\boldsymbol{k}$ は $|\boldsymbol{k}| \sim k_{\mathrm{F}}$ である。したがって, 平均的には $|\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'| \sim k_{\mathrm{F}}$ であり, C, B の括弧内の第 2 項は $1/q^2$ に比べて無視できる。以下では

$$C_{\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma'}(\boldsymbol{q}) = B_{\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma'}(\boldsymbol{q}) = \frac{v(q)}{V}\,, \qquad v(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2}$$

とする。(3.31), (3.32) に上式を代入すると

$$\Big(\hbar\omega - E_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} + E_{\boldsymbol{k}}\Big) X_{\boldsymbol{k}\sigma} = \frac{v(q)}{V} \left(\sum_{\boldsymbol{k}'\sigma'}^{+} X_{\boldsymbol{k}'\sigma'} + \sum_{\boldsymbol{k}'\sigma'}^{-} Y_{\boldsymbol{k}'\sigma'} \right)$$

$$-\Big(\hbar\omega + E_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} - E_{\boldsymbol{k}}\Big) Y_{\boldsymbol{k}\sigma} = \frac{v(q)}{V} \left(\sum_{\boldsymbol{k}'\sigma'}^{+} X_{\boldsymbol{k}'\sigma'} + \sum_{\boldsymbol{k}'\sigma'}^{-} Y_{\boldsymbol{k}'\sigma'} \right)$$

したがって

$$N = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma}^{+} X_{\boldsymbol{k}\sigma} + \sum_{\boldsymbol{k}\sigma}^{-} Y_{\boldsymbol{k}\sigma}$$

とおくと

$$X_{\boldsymbol{k}\sigma} = \frac{v(q)}{V}\frac{N}{\hbar\omega - E_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} + E_{\boldsymbol{k}}}\,, \qquad Y_{\boldsymbol{k}\sigma} = -\frac{v(q)}{V}\frac{N}{\hbar\omega + E_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} - E_{\boldsymbol{k}}}$$

これを N の定義式に代入すると

$$F(\omega, \boldsymbol{q}) = \frac{2v(q)}{V}\sum_{\boldsymbol{k}}\left(\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}(1-\theta_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}})}{\hbar\omega - E_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} + E_{\boldsymbol{k}}} - \frac{\theta_{\boldsymbol{k}}(1-\theta_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}})}{\hbar\omega + E_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} - E_{\boldsymbol{k}}}\right) = 1 \tag{3.33}$$

になる。因子 2 はスピンの自由度 (σ の和) であり

$$\theta_{\boldsymbol{k}} = \begin{cases} 1\,, & |\boldsymbol{k}| \le k_{\mathrm{F}} \\ 0\,, & |\boldsymbol{k}| > k_{\mathrm{F}} \end{cases}$$

である。

$$S = \sum_{\boldsymbol{k}}\left(\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}\theta_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}}{\hbar\omega - E_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} + E_{\boldsymbol{k}}} - \frac{\theta_{\boldsymbol{k}}\theta_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}}{\hbar\omega + E_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} - E_{\boldsymbol{k}}}\right)$$

の第 2 項で $\boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{q}$ とすると

$$\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}\theta_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}}{\hbar\omega + E_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} - E_{\boldsymbol{k}}} = \sum_{\boldsymbol{k}'}\frac{\theta_{\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}}\theta_{\boldsymbol{k}'}}{\hbar\omega + E_{\boldsymbol{k}'} - E_{\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}}} = \sum_{\boldsymbol{k}}\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}\theta_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}}{\hbar\omega - E_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} + E_{\boldsymbol{k}}}\,, \qquad \therefore \qquad S = 0$$

になるから

$$F(\omega, \boldsymbol{q}) = \frac{2v(q)}{V}\sum_{\boldsymbol{k}}\theta_{\boldsymbol{k}}\left(\frac{1}{\hbar\omega - E_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} + E_{\boldsymbol{k}}} - \frac{1}{\hbar\omega + E_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} - E_{\boldsymbol{k}}}\right) \tag{3.34}$$

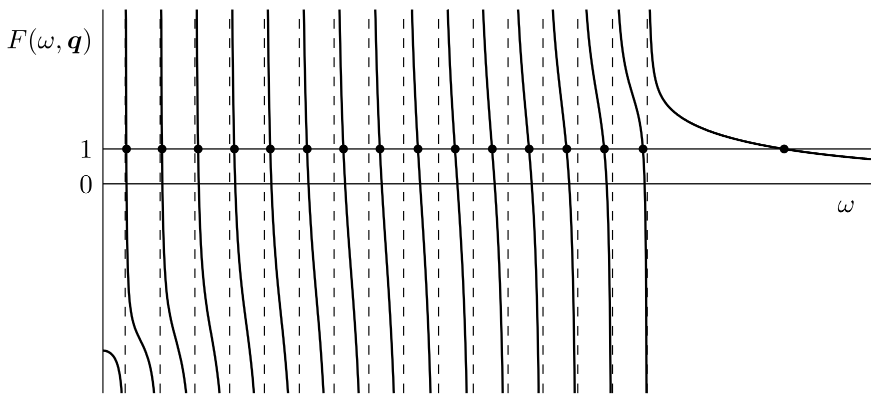
である。第 2 項で $\boldsymbol{k}$ を $-\boldsymbol{k}$ に置き換え $\theta_{-\boldsymbol{k}} = \theta_{\boldsymbol{k}}$, $E_{-\boldsymbol{k}} = E_{\boldsymbol{k}}$ を使うと

$$F(\omega, \boldsymbol{q}) = \frac{2v(q)}{V}\sum_{\boldsymbol{k}}\theta_{\boldsymbol{k}}\frac{2\hbar\omega_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}}}{(\hbar\omega)^2 - (\hbar\omega_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}})^2}\,, \qquad \hbar\omega_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}} = E_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} - E_{\boldsymbol{k}} \tag{3.35}$$

と表すこともできる。$F(\omega, \boldsymbol{q})$ を ω の関数として図示すると下図のようになる。$F(\omega, \boldsymbol{q})$ は $\omega = \pm\omega_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}}$ で発散し, $\omega \to \infty$ では $1/\omega^2$ に比例する。系の体積 V が有限ならば $\boldsymbol{k}$ は離散的であるから $\omega_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}}$ も離散的な値をとる。破線は

$$\omega = \omega_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}} = \frac{\hbar}{2m}\Big(2\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q} + q^2\Big)\,, \quad ただし\ \ |\boldsymbol{k}| \le k_{\mathrm{F}}\,,\ |\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}| > k_{\mathrm{F}} \tag{3.36}$$

である。交点 ● の ω が $F(\omega, \boldsymbol{q}) = 1$ の解を与える。



図から分かるように解には 2 種類ある。1 つは破線に挟まれた解である。$V \to \infty$ では破線の間隔は無限小になるから, この解は $\omega_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}}$ になり連続的に分布する。これは粒子・空孔励起である。粒子・空孔励起の ω には $|\boldsymbol{k}| \le k_\mathrm{F}$ であるため上限 ω_max がある。(3.36) より

$$\omega_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}} = \frac{\hbar}{2m}\Big(2\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q} + q^2\Big) \le \frac{\hbar}{2m}\Big(2kq + q^2\Big) \le \frac{\hbar}{2m}\Big(2k_\mathrm{F}q + q^2\Big) = \omega_\mathrm{max}(q)$$

である。

残りの解は, 前図で $1/\omega^2$ で減少していく曲線との交点である。これは粒子・空孔励起とは別の種類の励起で集団励起である。プラズマの場合, この励起状態はプラズマ振動と呼ばれ, 粒子・空孔励起よりも高い励起エネルギーに現れる。プラズマ振動の励起エネルギー ω を求めよう。(3.34) に $E_{\boldsymbol{k}} = \hbar^2\boldsymbol{k}^2/2m$ を代入し $\boldsymbol{k}$ の和を積分で表すと

$$\begin{aligned} F(\omega, \boldsymbol{q}) &= \frac{2v(q)}{V}\frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3k\,\theta_{\boldsymbol{k}}\left(\frac{1}{\hbar\omega - \hbar^2(2\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q} + q^2)/2m} - \frac{1}{\hbar\omega - \hbar^2(2\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q} - q^2)/2m}\right) \\ &= \frac{\hbar^2q^2}{4\pi^3 m}v(q)\int d^3k\,\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{\big(\hbar\omega - \hbar^2\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q}/m\big)^2 - \big(\hbar^2q^2/2m\big)^2} \end{aligned} \tag{3.37}$$

$q \to 0$ のとき $\omega \neq 0$ とすれば

$$\begin{aligned} F(\omega, \boldsymbol{q}) &= \frac{q^2v(q)}{4\pi^3m\omega^2}\int d^3k\,\theta_{\boldsymbol{k}}\left(1 + 2\frac{\hbar\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q}}{m\omega} + 3\left(\frac{\hbar\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q}}{m\omega}\right)^2 + \cdots\right) \\ &= \frac{q^2v(q)}{4\pi^3m\omega^2}\left(\frac{4\pi}{3}k_\mathrm{F}^3 + \frac{4\pi}{5}\left(\frac{\hbar q}{m\omega}\right)^2 k_\mathrm{F}^5 + \cdots\right) = \frac{q^2v(q)}{m\omega^2}\rho\left(1 + \frac{3}{5}\frac{v_\mathrm{F}^2}{\omega^2}q^2 + \cdots\right) \end{aligned} \tag{3.38}$$

ただし

$$\rho = \frac{k_\mathrm{F}^3}{3\pi^2}\,, \qquad v_\mathrm{F} = \frac{\hbar k_\mathrm{F}}{m}$$

になる。ρ は密度, v_F はフェルミ速度である。$q^2v(q) = 4\pi e^2$ であるから

$$F(\omega, \boldsymbol{q}) = \frac{\omega_\mathrm{p}^2}{\omega^2}\left(1 + \frac{3}{5}\frac{v_\mathrm{F}^2}{\omega^2}q^2 + \cdots\right), \qquad \omega_\mathrm{p} = \sqrt{\frac{4\pi e^2\rho}{m}}$$

$F = 1$ より

$$\omega \approx \omega_\mathrm{p}\sqrt{1 + \frac{3}{5}\frac{v_\mathrm{F}^2}{\omega_\mathrm{p}^2}q^2} \approx \omega_\mathrm{p}\left(1 + \frac{3}{10}\frac{v_\mathrm{F}^2}{\omega_\mathrm{p}^2}q^2\right) \tag{3.39}$$

になる。ω_p をプラズマ振動数という。

(3.37) より

$$F(\omega, \boldsymbol{q}) = v(q)\Big(f(\omega, \boldsymbol{q}) + f(-\omega, -\boldsymbol{q})\Big)\,, \qquad f(\omega, \boldsymbol{q}) = \frac{2}{(2\pi)^3}\int d^3k\,\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{\hbar\omega - \hbar^2(2\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q} + q^2)/2m}$$

と表せる。$k = k_\mathrm{F}t$, $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q} = kqs = k_\mathrm{F}qts$ とすると

$$f(\omega, \boldsymbol{q}) = \frac{2}{(2\pi)^3}2\pi k_\mathrm{F}^3\frac{m}{\hbar^2k_\mathrm{F}q}\int_0^1 dt\,t^2\int_{-1}^1 ds\,\frac{1}{x - ts}\,, \qquad x = \frac{m}{\hbar k_\mathrm{F}q}\left(\omega - \frac{\hbar q^2}{2m}\right)$$

である。$|x| \le 1$ のとき $x - ts = 0$ になる t, s が存在し被積分関数は発散するため, この発散を回避する必要がある。ここでは $|x| > 1$ の場合を考える。このとき

$$\begin{aligned} f(\omega, \boldsymbol{q}) &= \frac{mk_\mathrm{F}^2}{2\pi^2\hbar^2q}\int_0^1 dt\,t\Big(\log|t + x| - \log|t - x|\Big) \\ &= \frac{mk_\mathrm{F}^2}{4\pi^2\hbar^2q}\left[2xt + \big(t^2 - x^2\big)\log\left|\frac{t + x}{t - x}\right|\right]_{t=0}^{t=1} = \frac{mk_\mathrm{F}^2}{4\pi^2\hbar^2q}g(x) \end{aligned}$$

ただし

$$g(x)=2x+\left(1-x^2\right)\log\left|\frac{1+x}{1-x}\right|\,,\qquad g(x)\xrightarrow{x\to 0}4x-\frac{4x^3}{3}\,,\quad g(x)\xrightarrow{|x|\to\infty}\frac{4}{3x}+\frac{4}{15x^3}+\cdots$$

したがって

$$F(\omega,\boldsymbol{q})=\frac{mk_{\mathrm{F}}^2}{4\pi^2\hbar^2 q}v(q)\Big(g(x_+)+g(x_-)\Big)\,,\qquad x_\pm=\frac{m}{\hbar k_{\mathrm{F}}q}\left(\pm\,\omega-\frac{\hbar q^2}{2m}\right)\tag{3.40}$$

になる。ただし $|x_\pm|>1$, つまり $\omega>\omega_{\max}(q)$ の場合に上式は適用できる。

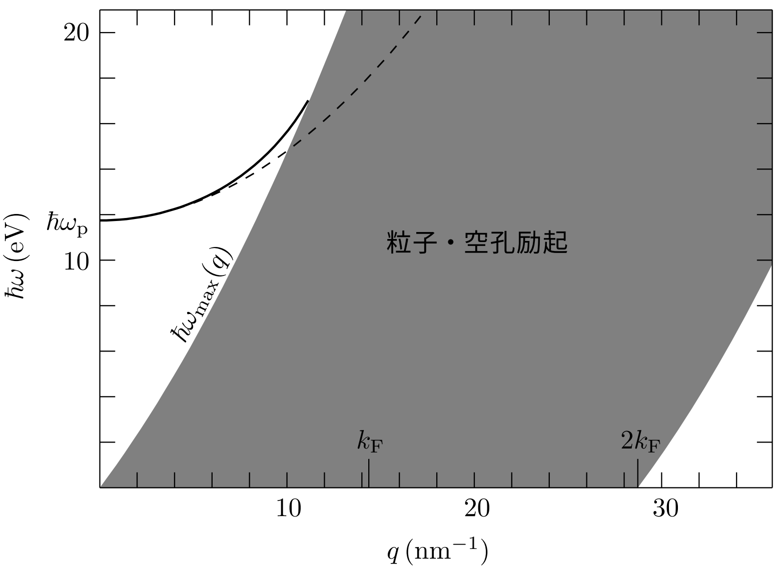
(3.40) を用いて $F(\omega,q)=1$ を数値的に解いた結果を下図に実線で示す。破線は近似解 (3.39) を表す。電子密度 ρ として金属中での電子密度 $\rho\approx 10^{23}\,\mathrm{cm}^{-3}=100\,\mathrm{nm}^{-3}$ を用いた。

$$mc^2\approx 0.5\times 10^6\,\mathrm{eV}\,,\quad \hbar c\approx 200\,\mathrm{eV\,nm}\,,\quad \alpha=\frac{e^2}{\hbar c}\approx\frac{1}{137}$$

であるから ω_{p} を概算すると

$$\hbar\omega_{\mathrm{p}}=\sqrt{\frac{4\pi\alpha(\hbar c)^3\rho}{mc^2}}\approx\sqrt{\frac{4\pi\times(200)^3\times 100}{137\times 0.5\times 10^6}}\,\mathrm{eV}=80\sqrt{\frac{\pi}{137}}\,\mathrm{eV}=12\,\mathrm{eV}$$

である。粒子・空孔励起エネルギーの最大値 $\omega_{\max}$ に対して $\omega(q)=\omega_{\max}(q)$ となる q 以上では, プラズマ振動に対応する実数解は存在しない。



プラズマ振動は次のような簡単な古典力学的議論でも導ける。電子の平衡状態の密度を ρ_0 とする。平衡状態ではプラズマは電気的に中性であるから, 正電荷の粒子の密度 ρ_{B} は $\rho_{\mathrm{B}}=\rho_0$ である。正電荷粒子は電子に比べて重いため, その電荷密度は電子の運動に無関係に常に ρ_0 とする。電子の密度が $\rho=\rho_0+\delta\rho(\boldsymbol{r},t)$ に変化したとすると, ポアソン方程式から

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{E}=4\pi e\Big(\rho_{\mathrm{B}}-\Big(\rho_0+\delta\rho(\boldsymbol{r},t)\Big)\Big)=-\,4\pi e\,\delta\rho(\boldsymbol{r},t)$$

の電場 $\boldsymbol{E}$ が発生する。電子ガスの速度場を $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r},t)$, 圧力を $P(\rho)$ とすると, 運動方程式は微小量の 1 次まで考えると

$$m\rho_0\frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial t}=-\,\boldsymbol{\nabla}P(\rho_0+\delta\rho)-e\rho_0\boldsymbol{E}=-\,\kappa\boldsymbol{\nabla}\delta\rho-e\rho_0\boldsymbol{E}\,,\qquad\kappa=\left.\frac{\partial P}{\partial\rho}\right|_{\rho=\rho_0}$$

である。また, 連続の方程式は

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot \rho\, \boldsymbol{v} = \frac{\partial \delta\rho}{\partial t} + \rho_0 \boldsymbol{\nabla}\cdot \boldsymbol{v} = 0$$

である。したがって

$$\frac{\partial^2 \delta\rho}{\partial t^2} = -\,\rho_0 \boldsymbol{\nabla}\cdot \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} = \frac{\kappa}{m}\boldsymbol{\nabla}^2 \delta\rho + \frac{e\rho_0}{m}\boldsymbol{\nabla}\cdot \boldsymbol{E} = \frac{\kappa}{m}\boldsymbol{\nabla}^2\delta\rho - \frac{4\pi e^2 \rho_0}{m}\,\delta\rho \tag{3.41}$$

になる。長波長 ($q \to 0$) では右辺第 1 項は第 2 項に比べて無視できるから

$$\frac{\partial^2 \delta\rho}{\partial t^2} = -\,\frac{4\pi e^2 \rho_0}{m}\,\delta\rho$$

これから $\delta\rho$ は角振動数

$$\sqrt{\frac{4\pi e^2 \rho_0}{m}}$$

で振動する。

3.4 ゼロ音波

プラズマ振動では, クーロン相互作用が $1/r$ という長距離力であるため, 言い換えれば, フーリエ変換した $v(q)$ が $1/q^2$ という $q = 0$ で特異性を持つため, $q \to 0$ で ω は有限な値になる。ここで, 力の到達距離が有限の場合について考えてみよう。この極端な例として

$$v(1,2) = f_0\, \delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)$$

とすると

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{k}_1\sigma_1\,,\, \boldsymbol{k}_2\sigma_2 |\, v\, | \boldsymbol{k}'_1\sigma'_1\,,\, \boldsymbol{k}'_2\sigma'_2\rangle &= f_0 \frac{\delta_{\sigma_1\sigma'_1}\delta_{\sigma_2\sigma'_2}}{V^2}\int d^3r\, e^{-i(\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}'_1-\boldsymbol{k}'_2)\cdot\boldsymbol{r}} \\ &= f_0 \frac{\delta_{\sigma_1\sigma'_1}\delta_{\sigma_2\sigma'_2}}{V}\,\delta_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2\,,\,\boldsymbol{k}'_1+\boldsymbol{k}'_2}\end{aligned}$$

であるから

$$C_{\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma'} = B_{\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma'} = \frac{f_0}{V}\Big(1 - \delta_{\sigma\sigma'}\Big)$$

になる。(3.31), (3.32) より

$$N_\sigma = \sum_{\boldsymbol{k}}{}^{+} X_{\boldsymbol{k}\sigma} + \sum_{\boldsymbol{k}}{}^{-} Y_{\boldsymbol{k}\sigma}$$

とすると

$$X_{\boldsymbol{k}\sigma} = \frac{f_0}{V}\frac{N_+ + N_- - N_\sigma}{\hbar\omega - E_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} + E_{\boldsymbol{k}}}\,, \qquad Y_{\boldsymbol{k}\sigma} = -\,\frac{f_0}{V}\frac{N_+ + N_- - N_\sigma}{\hbar\omega + E_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} - E_{\boldsymbol{k}}}$$

である。これから

$$\begin{aligned} N_+ + N_- &= \sum_{\boldsymbol{k}\sigma}{}^{+} X_{\boldsymbol{k}\sigma} + \sum_{\boldsymbol{k}\sigma}{}^{-} Y_{\boldsymbol{k}\sigma} \\ &= (N_+ + N_-)\,\frac{f_0}{V}\left(\sum_{\boldsymbol{k}}{}^{+}\frac{1}{\hbar\omega - E_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} + E_{\boldsymbol{k}}} - \sum_{\boldsymbol{k}}{}^{-}\frac{1}{\hbar\omega + E_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} - E_{\boldsymbol{k}}}\right)\end{aligned}$$

(3.33) と比較すれば, $v(q) = 4\pi e^2/q^2$ を $v(q) = f_0/2$ で置き換えればよい。したがって, RPA の固有値 ω は (3.40) より

$$F(\omega, \boldsymbol{q}) = f_0\,\frac{m k_{\mathrm{F}}^2}{8\pi^2\hbar^2 q}\Big(g(x_+) + g(x_-)\Big) = 1 \tag{3.42}$$

で決まる。$q\to 0$ のとき $\omega\neq 0$ とすると (3.38) から

$$F(\omega,\boldsymbol{q})=f_0\,\frac{\rho q^2}{2m\omega^2}+\cdots\to 0$$

になり $F=1$ を満たさない。$\omega\xrightarrow{q\to 0}0$ である。そこで ω と q の比は有限として $q\to 0$ を考える。

$$x_\pm=\frac{m}{\hbar k_{\rm F}q}\left(\pm\,\omega-\frac{\hbar q^2}{2m}\right)=\pm\,x-\mathit{\Delta}\,,\qquad x=\frac{m\omega}{\hbar k_{\rm F}q}=\frac{\omega}{v_{\rm F}q}\,,\quad \mathit{\Delta}=\frac{q}{2k_{\rm F}}\to 0$$

であるから, $g(x_\pm)$ を $\pm x$ のまわりでテイラー展開すると ($g(x)$ は x の奇関数)

$$\begin{aligned}g(x_+)+g(x_-)&=g(x)-g'(x)\mathit{\Delta}+g(-x)-g'(-x)\mathit{\Delta}\\&=-\,2g'(x)\mathit{\Delta}=-\,8\mathit{\Delta}\left(1-\frac{x}{2}\log\left|\frac{1+x}{1-x}\right|\right)\end{aligned}$$

これから (3.42) は

$$F(x)=\frac{x}{2}\log\left|\frac{1+x}{1-x}\right|-1=\frac{1}{F_0}\,,\qquad F_0=\frac{mk_{\rm F}}{2\pi^2\hbar^2}\,f_0 \tag{3.43}$$

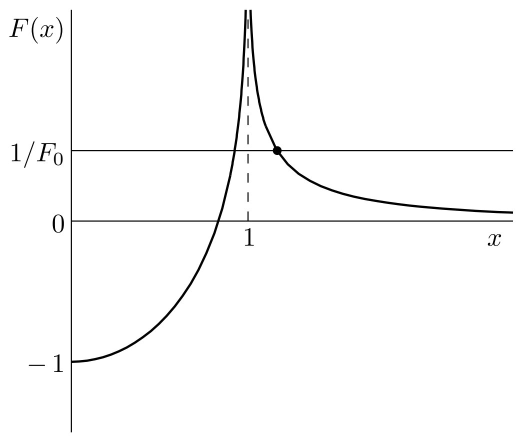
になる。ところで, 粒子・空孔励起エネルギーの最大値 $\omega_{\rm max}$ は $q\to 0$ のとき

$$\omega_{\rm max}=\frac{\hbar}{2m}\Big(2k_{\rm F}q+q^2\Big)\approx\frac{\hbar k_{\rm F}q}{m}=v_{\rm F}q$$

である。実数解 ω として意味があるのは $\omega>\omega_{\rm max}$ を満たす解, つまり $x>1$ である。右図から分かるように, $f_0>0$ ならば常に $x>1$ の解が存在する。この解を $x(f_0)$ とすると

$$\omega=v_{\rm F}x(f_0)\,q$$

であり ω は q に比例する。これは音波と同じ分散関係にあり, 絶対温度 $=0$ で存在する音波という意味で**ゼロ音波** (zero sound) と呼ばれる。ゼロ音波の速さは $v_{\rm F}x(f_0)$ であるが, これはフェルミ速度 $v_{\rm F}$ より大きい。



第一音波 (first sound) と呼ばれる普通の音波と比較してみる。(3.41) において電荷 $e=0$ とすると

$$\frac{\partial^2\delta\rho}{\partial t^2}=\frac{\kappa}{m}\boldsymbol{\nabla}^2\delta\rho$$

これから音速を c とすると

$$c=\sqrt{\frac{\kappa}{m}}$$

になる。フェルミガスの場合

$$P=\frac{2}{5}\frac{\hbar^2k_{\rm F}^2}{2m}\,\rho=\frac{2}{5}(3\pi^2)^{2/3}\frac{\hbar^2}{2m}\,\rho^{5/3}$$

であるから

$$\kappa=\frac{1}{3}\frac{\hbar^2k_{\rm F}^2}{m}\,,\qquad \text{したがって}\qquad c=\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{\hbar k_{\rm F}}{m}=\frac{v_{\rm F}}{\sqrt{3}}<v_{\rm F}$$

になる。

問 3.1　(3.43) の解は近似的に

$$x \approx \begin{cases} 1 + 2e^{-2/F_0}\,, & F_0 \to +0 \text{ のとき} \\ \sqrt{F_0/3}\,, & F_0 \to \infty \text{ のとき} \end{cases}$$

で与えられることを示せ。

3.5　RPA の性質

複数の RPA 解を区別するため, 固有値 $\hbar\omega$ と係数 $X_{ph}\,, Y_{ph}$ に λ を付けて $\hbar\omega_\lambda\,, X^\lambda_{ph}\,, Y^\lambda_{ph}$ とする。また, X^λ_{ph} あるいは Y^λ_{ph} を成分とするベクトルをそれぞれ X^λ あるいは Y^λ で表す。簡略化のため

$$\begin{pmatrix} X^\lambda & Y^\lambda \end{pmatrix} \text{ の場合 } X^\lambda, Y^\lambda \text{ は行ベクトル} \qquad \begin{pmatrix} X^\lambda \\ Y^\lambda \end{pmatrix} \text{ の場合 } X^\lambda, Y^\lambda \text{ は列ベクトル}$$

と約束すれば, $X^\lambda\,, Y^\lambda$ が行ベクトルか列ベクトルかは混乱しないので, 表記上では区別しない。

1. 一体演算子 F の遷移行列要素は

$$\langle\lambda|F|\,0\,\rangle = \langle\,0\,|O_\lambda F|\,0\,\rangle = \langle\,0\,|\,[\,O_\lambda\,,\,F\,]\,|\,0\,\rangle \approx \langle\;|\,[\,O_\lambda\,,\,F\,]\,|\;\rangle$$

である。

$$[\,a^\dagger_{\alpha'}a_{\beta'}\,,\,a^\dagger_\alpha a_\beta\,] = \delta_{\alpha\beta'}a^\dagger_{\alpha'}a_\beta - \delta_{\beta\alpha'}a^\dagger_\alpha a_{\beta'}$$

より

$$\begin{aligned}\langle\;|\,[\,O_\lambda\,,\,F\,]\,|\;\rangle &= \sum_{ph}\sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta}\left(X^{\lambda\,*}_{ph}\langle\;|[\,a^\dagger_h a_p\,,\,a^\dagger_\alpha a_\beta\,]|\;\rangle - Y^{\lambda\,*}_{ph}\langle\;|[\,a^\dagger_p a_h\,,\,a^\dagger_\alpha a_\beta\,]|\;\rangle\right) \\ &= \sum_{ph}\left(X^{\lambda\,*}_{ph} f_{ph} + Y^{\lambda\,*}_{ph} f_{hp}\right)\end{aligned}$$

である。したがって

$$\langle\lambda|F|\,0\,\rangle \approx \langle\;|\,[\,O_\lambda\,,\,F\,]\,|\;\rangle = \sum_{ph}\left(X^{\lambda\,*}_{ph} f_{ph} + Y^{\lambda\,*}_{ph} f_{hp}\right) = \begin{pmatrix} X^{\lambda\,*} & Y^{\lambda\,*} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} f \\ \overline{f} \end{pmatrix} \tag{3.44}$$

になる。ただし

$$\overline{f}_{ph} \equiv f_{hp}$$

である。RPA では一体演算子の空孔–空孔, 粒子–粒子成分は無視されるから, F は

$$F = \sum_{ph}\left(f_{ph}\, a^\dagger_p a_h + f_{hp}\, a^\dagger_h a_p \right) \tag{3.45}$$

と同等である。

2. ω_λ は実数であると仮定する。(3.21) の複素共役を取ると

$$A^* X^{\lambda\,*} + B^* Y^{\lambda\,*} = \hbar\omega_\lambda X^{\lambda\,*}\,, \qquad B X^{\lambda\,*} + A Y^{\lambda\,*} = -\,\hbar\omega_\lambda Y^{\lambda\,*}$$

であるから

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} Y^{\lambda\,*} \\ X^{\lambda\,*} \end{pmatrix} = -\,\hbar\omega_\lambda\begin{pmatrix} Y^{\lambda\,*} \\ -\,X^{\lambda\,*} \end{pmatrix} \tag{3.46}$$

になる。$O_\lambda^\dagger$ が正の固有値 ω_λ を与えるとき

$$-O_\lambda = \sum_{ph} \left(Y_{ph}^{\lambda *} a_p^\dagger a_h - X_{ph}^{\lambda *} a_h^\dagger a_p \right)$$

が負の固有値 $-\hbar\omega_\lambda$ の解になることを示している。

3. 規格直交性 (3.21) から

$$\begin{pmatrix} X^{\lambda *} & Y^{\lambda *} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\rho \\ Y^\rho \end{pmatrix} = \hbar\omega_\rho \begin{pmatrix} X^{\lambda *} & Y^{\lambda *} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\rho \\ -Y^\rho \end{pmatrix} \tag{3.47}$$

λ と ρ を入れ換えエルミート共役をとると

$$\begin{pmatrix} X^{\lambda *} & Y^{\lambda *} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^\dagger & B^{*\dagger} \\ B^\dagger & A^{*\dagger} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\rho \\ Y^\rho \end{pmatrix} = \hbar\omega_\lambda \begin{pmatrix} X^{\lambda *} & Y^{\lambda *} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\rho \\ -Y^\rho \end{pmatrix} \tag{3.48}$$

ところで

$$(A^\dagger)_{ph\,p'h'} = A^*_{p'h'\,ph} = (\epsilon_p - \epsilon_h)\,\delta_{hh'}\,\delta_{pp'} + \overline{v}^*_{p'h\,h'p} = (\epsilon_p - \epsilon_h)\,\delta_{hh'}\,\delta_{pp'} + \overline{v}_{h'p\,p'h} = A_{ph\,p'h'}$$

$$(B^\dagger)_{ph\,p'h'} = B^*_{p'h'\,ph} = \overline{v}^*_{p'p\,h'h} = \overline{v}^*_{pp'\,hh'} = B^*_{ph\,p'h'}$$

つまり, $A^\dagger = A$, $B^\dagger = B^*$ であるから (3.48) は

$$\begin{pmatrix} X^{\lambda *} & Y^{\lambda *} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\rho \\ Y^\rho \end{pmatrix} = \hbar\omega_\lambda \begin{pmatrix} X^{\lambda *} & Y^{\lambda *} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\rho \\ -Y^\rho \end{pmatrix}$$

になる。これと (3.47) より

$$(\hbar\omega_\lambda - \hbar\omega_\rho) \begin{pmatrix} X^{\lambda *} & Y^{\lambda *} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\rho \\ -Y^\rho \end{pmatrix} = 0$$

$\omega_\lambda \neq \omega_\rho$ ならば

$$\begin{pmatrix} X^{\lambda *} & Y^{\lambda *} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\rho \\ -Y^\rho \end{pmatrix} = 0$$

である。RPA の固有状態は

$$\begin{aligned} \langle \lambda | \rho \rangle = \langle 0 | O_\lambda O_\rho^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | \left[O_\lambda\,, O_\rho^\dagger \right] | 0 \rangle \approx \langle \,| \left[O_\lambda\,, O_\rho^\dagger \right] |\, \rangle \\ = \sum_{ph} \left(X_{ph}^{\lambda *} X_{ph}^\rho - Y_{ph}^{\lambda *} Y_{ph}^\rho \right) \\ = \begin{pmatrix} X^{\lambda *} & Y^{\lambda *} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\rho \\ -Y^\rho \end{pmatrix} \end{aligned}$$

したがって, $\omega_\lambda \neq \omega_\rho$ ならば $\langle \lambda | \rho \rangle = 0$ になり直交する。一方, 規格化は $\langle \lambda | \lambda \rangle = 1$ であるから, 規格直交条件を

$$\langle \,| \left[O_\lambda\,, O_\rho^\dagger \right] |\, \rangle = \begin{pmatrix} X^{\lambda *} & Y^{\lambda *} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\rho \\ -Y^\rho \end{pmatrix} = \delta_{\lambda\rho} \tag{3.49}$$

のように決める。

次に (3.46) のエルミート共役をとると

$$\begin{pmatrix} Y^\lambda & X^\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} = -\hbar\omega_\lambda \begin{pmatrix} Y^\lambda & -X^\lambda \end{pmatrix}$$

であるから

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} Y^\lambda & -X^\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\rho \\ Y^\rho \end{pmatrix} &= -\hbar\omega_\lambda \begin{pmatrix} Y^\lambda & -X^\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\rho \\ Y^\rho \end{pmatrix} \\ &= -\hbar\omega_\lambda \begin{pmatrix} Y^\lambda & X^\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\rho \\ -Y^\rho \end{pmatrix} \end{aligned}$$

一方

$$\begin{pmatrix} Y^\lambda & X^\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\rho \\ Y^\rho \end{pmatrix} = \hbar\omega_\rho \begin{pmatrix} Y^\lambda & X^\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\rho \\ -Y^\rho \end{pmatrix}$$

であるから

$$(\hbar\omega_\lambda + \hbar\omega_\rho) \begin{pmatrix} Y^\lambda & X^\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\rho \\ -Y^\rho \end{pmatrix} = 0$$

したがって $\hbar\omega_\lambda + \hbar\omega_\rho \neq 0$ より

$$\begin{pmatrix} Y^\lambda & X^\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\rho \\ -Y^\rho \end{pmatrix} = \sum_{ph} \left(Y^\lambda_{ph} X^\rho_{ph} - X^\lambda_{ph} Y^\rho_{ph} \right) = 0 \tag{3.50}$$

になる。これは

$$\langle \,|\, [\, O_\lambda \,,\, O_\rho \,] \,|\, \rangle = \langle \,|\, \left[\, O^\dagger_\lambda \,,\, O^\dagger_\rho \,\right] \,|\, \rangle = 0 \tag{3.51}$$

を表す。(3.49) と (3.51) から, O と $O^\dagger$ は, 期待値ではあるが, ボソンの交換関係を満たす。

4. **完備性**　$O^\dagger_\lambda$ と O_λ は RPA 方程式の解であるが, $\omega_\lambda \neq 0$ ならば固有値が異なるから独立な解である。このとき, RPA 方程式の独立な解 $O^\dagger_\lambda$ と O_λ の個数は $a^\dagger_p a_h$, $a^\dagger_h a_p$ の個数に等しい。したがって RPA での一体演算子

$$F = \sum_{ph} \left(f_{ph}\, a^\dagger_p a_h + f_{hp}\, a^\dagger_h a_p \right)$$

は $a^\dagger_p a_h$, $a^\dagger_h a_p$ の代わりに $O^\dagger_\lambda$, O_λ で表せる。そこで

$$F = \sum_\lambda \left(u_\lambda\, O^\dagger_\lambda - v_\lambda\, O_\lambda \right) \tag{3.52}$$

とする。(3.49), (3.51) から

$$u_\lambda = \langle \,|\, [\, O_\lambda \,,\, F \,] \,|\, \rangle \,, \qquad v_\lambda = \langle \,|\, \left[\, O^\dagger_\lambda \,,\, F \,\right] \,|\, \rangle = -\langle \,|\, \left[\, O_\lambda \,,\, F^\dagger \,\right] \,|\, \rangle^*$$

(3.44) を使うと

$$u_\lambda = \begin{pmatrix} X^{\lambda *} & Y^{\lambda *} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ \overline{f} \end{pmatrix}$$

$(f^\dagger)_{\alpha\beta} = f^*_{\beta\alpha}$ であるから

$$v_\lambda = -\begin{pmatrix} X^\lambda & Y^\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overline{f} \\ f \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} Y^\lambda & X^\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ \overline{f} \end{pmatrix}$$

(3.52) に

$$O_\lambda^\dagger = \sum_{ph} \Big(X_{ph}^\lambda \, a_p^\dagger a_h - Y_{ph}^\lambda \, a_h^\dagger a_p \Big)$$

を代入すると

$$F = \sum_\lambda \sum_{ph} \left(\Big(X_{ph}^\lambda u_\lambda + {Y_{ph}^\lambda}^* v_\lambda \Big) a_p^\dagger a_h - \Big(Y_{ph}^\lambda u_\lambda + {X_{ph}^\lambda}^* v_\lambda \Big) a_h^\dagger a_p \right)$$

であるから

$$f_{ph} = \sum_\lambda \Big(X_{ph}^\lambda u_\lambda + {Y_{ph}^\lambda}^* v_\lambda \Big) , \qquad f_{hp} = - \sum_\lambda \Big(Y_{ph}^\lambda u_\lambda + {X_{ph}^\lambda}^* v_\lambda \Big)$$

つまり

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} f \\ \bar{f} \end{pmatrix} &= \sum_\lambda \left(\begin{pmatrix} X^\lambda \\ -Y^\lambda \end{pmatrix} u_\lambda + \begin{pmatrix} Y^{\lambda *} \\ -X^{\lambda *} \end{pmatrix} v_\lambda \right) \\ &= \sum_\lambda \left(\begin{pmatrix} X^\lambda \\ -Y^\lambda \end{pmatrix} \big(X^{\lambda *} \;\; Y^{\lambda *} \big) - \begin{pmatrix} Y^{\lambda *} \\ -X^{\lambda *} \end{pmatrix} \big(Y^\lambda \;\; X^\lambda \big) \right) \begin{pmatrix} f \\ \bar{f} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

したがって, 完備性の関係式

$$\sum_\lambda \left(\begin{pmatrix} X^\lambda \\ -Y^\lambda \end{pmatrix} \big(X^{\lambda *} \;\; Y^{\lambda *} \big) - \begin{pmatrix} Y^{\lambda *} \\ -X^{\lambda *} \end{pmatrix} \big(Y^\lambda \;\; X^\lambda \big) \right) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = 1 \tag{3.53}$$

を得る。成分で表せば

$$\sum_\lambda \big(X_{ph}^\lambda X_{p'h'}^{\lambda *} - Y_{ph}^{\lambda *} Y_{p'h'}^\lambda \big) = \delta_{pp'} \delta_{hh'} \, , \qquad \sum_\lambda \big(X_{ph}^\lambda Y_{p'h'}^{\lambda *} - Y_{ph}^{\lambda *} X_{p'h'}^\lambda \big) = 0$$

になる。これと形式的に似た関係式が規格直交性 (3.49), (3.50)

$$\sum_{ph} \Big({X_{ph}^\lambda}^* X_{ph}^{\lambda'} - {Y_{ph}^\lambda}^* Y_{ph}^{\lambda'} \Big) = \delta_{\lambda\lambda'} \, , \qquad \sum_{ph} \Big(Y_{ph}^\lambda X_{ph}^{\lambda'} - X_{ph}^\lambda Y_{ph}^{\lambda'} \Big) = 0$$

である。

問 3.2 1. 残留相互作用が分離型 (3.7) の場合 (3.27) より

$$X_{ph}^\lambda = \frac{C f_{ph}}{\hbar\omega_\lambda - \epsilon_{ph}} \, , \qquad Y_{ph}^\lambda = - \frac{C f_{ph}^*}{\hbar\omega_\lambda + \epsilon_{ph}}$$

である。規格化条件から $|C|^2$ を求めよ。この X_{ph}^λ, Y_{ph}^λ を (3.44) に代入して

$$|\langle \lambda | F | \, 0 \, \rangle|^2 = \left(4\kappa^2 \hbar\omega_\lambda \sum_{ph} \frac{\epsilon_{ph} |f_{ph}|^2}{\Big((\hbar\omega_\lambda)^2 - \epsilon_{ph}^2 \Big)^2} \right)^{-1} = - \left(\kappa^2 \frac{dD_{\mathrm{RPA}}(\hbar\omega_\lambda)}{d\hbar\omega_\lambda} \right)^{-1} \tag{3.54}$$

を示せ。ここで $D_{\mathrm{RPA}}(\hbar\omega_\lambda)$ は (3.28) で定義したものである。

2. ϵ_{ph} が ϵ に縮退している場合

$$|\langle \lambda | F | \, 0 \, \rangle|^2 = \frac{\epsilon}{\hbar\omega_\lambda} \sum_{ph} |f_{ph}|^2$$

を示せ。

3.6　HF 基底状態の安定性

g_{ph} を任意の複素数として

$$G = \sum_{ph} \Big(g_{ph} a_p^\dagger a_h - g_{ph}^* a_h^\dagger a_p \Big) \,, \qquad G^\dagger = - G$$

とする。$U = e^G$ は $U^\dagger U = e^{-G} e^G = 1$ でありユニタリ演算子である。HF 基底状態 $|\,\rangle$

$$|\,\rangle = a_1^\dagger \cdots a_N^\dagger |\,\mathrm{vac}\,\rangle \,, \qquad a_\alpha |\,\mathrm{vac}\,\rangle = 0$$

に対して

$$|\,g\,\rangle = U|\,\rangle = U a_1^\dagger U^\dagger U a_2^\dagger U^\dagger \cdots U a_N^\dagger U^\dagger U |\,\mathrm{vac}\,\rangle = b_1^\dagger \cdots b_N^\dagger U |\,\mathrm{vac}\,\rangle \,, \qquad b_\alpha^\dagger = U a_\alpha^\dagger U^\dagger$$

を考える。$G|\,\mathrm{vac}\,\rangle = 0$ より

$$U|\,\mathrm{vac}\,\rangle = \big(1 + G + G^2/2! + \cdots \big) \,|\,\mathrm{vac}\,\rangle = |\,\mathrm{vac}\,\rangle \,, \qquad \therefore \qquad |\,g\,\rangle = b_1^\dagger \cdots b_N^\dagger |\,\mathrm{vac}\,\rangle$$

になる。反交換関係

$$\{\, b_\alpha \,,\, b_{\alpha'}^\dagger \,\} = U \{\, a_\alpha \,,\, a_{\alpha'}^\dagger \,\} U^\dagger = \delta_{\alpha\alpha'} U U^\dagger = \delta_{\alpha\alpha'} \,, \qquad \{\, b_\alpha \,,\, b_{\alpha'} \,\} = \{\, b_\alpha^\dagger \,,\, b_{\alpha'}^\dagger \,\} = 0$$

を満たすから, $|\,g\,\rangle$ も規格化された N 粒子系のスレーター行列式である。$|\,g\,\rangle$ は $|\,\rangle$ と直交しない任意のスレーター行列式を表す。

$|\,g\,\rangle$ での H の期待値は

$$\langle\, g\,|H|\,g\,\rangle = \langle\,|e^{-G} H e^G|\,\rangle = \langle\,|\left(H + [\,H\,,\,G\,] + \frac{1}{2!}[\,[\,H\,,\,G\,]\,,\,G\,] + \cdots \right)|\,\rangle$$

であるから, $\langle\,|H|\,\rangle$ が極小値になる条件は $G \neq 0$ のとき

$$\langle\,|[\,H\,,\,G\,]|\,\rangle = 0 \,, \qquad D_c = \langle\,|[\,[\,H\,,\,G\,]\,,\,G\,]|\,\rangle > 0$$

である。第 1 式が停留値になる条件, 第 2 式が極小値になる条件 (安定性の条件) である。

$$\begin{aligned} \langle\,|[\,H\,,\,G\,]|\,\rangle &= \sum_{ph} g_{ph} \langle\,|[\,H\,,\,a_p^\dagger a_h\,]|\,\rangle - \sum_{ph} g_{ph}^* \langle\,|[\,H\,,\,a_h^\dagger a_p\,]|\,\rangle \\ &= \sum_{ph} g_{ph} \langle\,|H a_p^\dagger a_h|\,\rangle + \sum_{ph} g_{ph}^* \langle\,|a_h^\dagger a_p H|\,\rangle \end{aligned}$$

1 粒子状態 $|\,\alpha\,\rangle$ が HF 方程式を満たす, つまり $h_{\mathrm{HF}}|\,\alpha\,\rangle = \varepsilon_\alpha |\,\alpha\,\rangle$ であれば, **問 2.3** より

$$\langle\,|a_h^\dagger a_p H|\,\rangle = \langle\, p\,|\,h_{\mathrm{HF}}\,|\,h\,\rangle = 0$$

になるから停留値の条件を満たす。

$$\begin{aligned} D_c &= -\langle\,|[\,G\,,\,[\,H\,,\,G\,]]|\,\rangle \\ &= -\sum_{php'h'} \langle\,|[\,g_{ph} a_p^\dagger a_h - g_{ph}^* a_h^\dagger a_p \,,\, [\,H\,,\,g_{p'h'} a_{p'}^\dagger a_{h'} - g_{p'h'}^* a_{h'}^\dagger a_{p'}\,]]|\,\rangle \\ &= \sum_{php'h'} g_{ph} \Big(-\langle\,|[\,a_p^\dagger a_h\,,\,[\,H\,,\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,]]|\,\rangle g_{p'h'} + \langle\,|[\,a_p^\dagger a_h\,,\,[\,H\,,\,a_{h'}^\dagger a_{p'}\,]]|\,\rangle g_{p'h'}^* \Big) \\ &\quad + \sum_{php'h'} g_{ph}^* \Big(\langle\,|[\,a_h^\dagger a_p\,,\,[\,H\,,\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,]]|\,\rangle g_{p'h'} - \langle\,|[\,a_h^\dagger a_p\,,\,[\,H\,,\,a_{h'}^\dagger a_{p'}\,]]|\,\rangle g_{p'h'}^* \Big) \end{aligned}$$

(3.18), (3.19) より

$$A_{ph\,p'h'} = \langle\,|[\,a_h^\dagger a_p\,,\,[H\,,\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,]\,]|\,\rangle\,, \qquad A^*_{ph\,p'h'} = \langle\,|[\,a_p^\dagger a_h\,,\,[H\,,\,a_{h'}^\dagger a_{p'}\,]\,]|\,\rangle$$

$$B_{ph\,p'h'} = -\langle\,|[\,a_h^\dagger a_p\,,\,[H\,,\,a_{h'}^\dagger a_{p'}\,]\,]|\,\rangle\,, \qquad B^*_{ph\,p'h'} = -\langle\,|[\,a_p^\dagger a_h\,,\,[H\,,\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,]\,]|\,\rangle$$

であるから

$$D_c = gB^*g + gA^*g^* + g^*Ag + g^*Bg^* = (\,g^*\ \ g\,)\,M\begin{pmatrix} g \\ g^* \end{pmatrix} > 0\,, \qquad M \equiv \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}$$

が安定性の条件である。ただし, 列 (行) ベクトル中の g は g_{ph} を成分とする列 (行) ベクトルとする。

ところで

$$A_{ph\,p'h'} = \epsilon_{ph}\,\delta_{hh'}\,\delta_{pp'} + \overline{v}_{ph'\,hp'}\,, \qquad B_{ph\,p'h'} = \overline{v}_{pp'\,hh'}$$

であるから

$$(A^\dagger)_{ph\,p'h'} = A^*_{p'h'\,ph} = \epsilon_{ph}\delta_{hh'}\,\delta_{pp'} + \overline{v}^*_{p'h\,h'p} = \epsilon_{ph}\delta_{hh'}\,\delta_{pp'} + \overline{v}_{h'p\,p'h} = A_{ph\,p'h'}$$

$$B_{ph\,p'h'} = \overline{v}_{p'p\,h'h} = B_{p'h'\,ph}\,, \qquad \therefore \qquad (B^\dagger)_{ph\,p'h'} = B^*_{p'h'\,ph} = B^*_{ph\,p'h'}$$

つまり, $A^\dagger = A$, $B^\dagger = B^*$ より

$$M^\dagger = \begin{pmatrix} A^\dagger & B^{*\,\dagger} \\ B^\dagger & A^{*\,\dagger} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} = M$$

であり M はエルミート行列である。M の固有値を m とすると

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = m\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

複素共役をとると (m は実数)

$$\begin{pmatrix} A^* & B^* \\ B & A \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x^* \\ y^* \end{pmatrix} = m\begin{pmatrix} x^* \\ y^* \end{pmatrix}, \quad \therefore \quad \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y^* \\ x^* \end{pmatrix} = m\begin{pmatrix} y^* \\ x^* \end{pmatrix}$$

になるから, M の固有ベクトルとして

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} y^* \\ x^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x+y^* \\ (x+y^*)^* \end{pmatrix}, \quad \text{または} \quad i\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} - i\begin{pmatrix} y^* \\ x^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ix-iy^* \\ (ix-iy^*)^* \end{pmatrix}$$

つまり

$$\begin{pmatrix} g \\ g^* \end{pmatrix}, \qquad g = x+y^* \quad \text{または} \quad g = ix-iy^*$$

を採用できる。この 2 つのベクトルが同時に 0 になることはない。$g \neq 0$ に対して

$$(\,g^*\ \ g\,)\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} g \\ g^* \end{pmatrix} = m\,(\,g^*\ \ g\,)\begin{pmatrix} g \\ g^* \end{pmatrix} = 2m\sum_{ph}|g_{ph}|^2$$

したがって, 安定性の条件が成り立つとき, 行列 M の固有値はすべて正である。エルミート行列の固有ベクトルは, 縮退があっても規格直交系にできる。また, 任意のベクトルは固有ベクトルで展開できるから c_m を係数として

$$\begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = \sum_m c_m\begin{pmatrix} x_m \\ y_m \end{pmatrix}, \qquad \therefore \qquad (\,f^*\ \ g^*\,)\,M\begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = \sum_m m\,|c_m|^2$$

になる。行列 M の固有値がすべて正ならば M の期待値は常に正であり, $g = f^*$ とすると安定性の条件になる。

RPA 方程式は

$$M \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} X \\ -Y \end{pmatrix}$$

であるから

$$(X^* \ \ Y^*) \, M \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \hbar\omega N \,, \qquad N = (X^* \ \ Y^*) \begin{pmatrix} X \\ -Y \end{pmatrix} = \sum_{ph} \Big(|X_{ph}|^2 - |Y_{ph}|^2 \Big)$$

になる。$\hbar\omega N$ と N は実数である。ただし $N = 0$ の場合 $\hbar\omega$ は実数とは限らない。安定性の条件が成り立つとき $\hbar\omega N > 0$ になるから $\hbar\omega \neq 0$ は実数で N と $\hbar\omega$ は同符号である。$\mathrm{Im}\,\omega \neq 0$ の解が存在するならば $N = 0$ であり, 安定性の条件は成り立たない。

簡単のため $\mu = ph$, $\mu' = p'h'$ で表す。38 ページの分離型相互作用

$$A_{\mu\mu'} = \epsilon_\mu \delta_{\mu\mu'} + \kappa f_\mu f^*_{\mu'} \,, \qquad B_{\mu\mu'} = \kappa f_\mu f_{\mu'}$$

の場合, M の固有値方程式は

$$\epsilon_\mu x_\mu + \kappa f_\mu \sum_{\mu'} \Big(f^*_{\mu'} x_{\mu'} + f_{\mu'} y_{\mu'} \Big) = m \, x_\mu \,, \qquad \epsilon_\mu y_\mu + \kappa f^*_\mu \sum_{\mu'} \Big(f^*_{\mu'} x_{\mu'} + f_{\mu'} y_{\mu'} \Big) = m \, y_\mu$$

になるから $A = \kappa \sum_\mu \Big(f^*_\mu x_\mu + f_\mu y_\mu \Big)$ とすると

$$x_\mu = \frac{A f_\mu}{m - \epsilon_\mu} \,, \qquad y_\mu = \frac{A f^*_\mu}{m - \epsilon_\mu} \,, \qquad \therefore \qquad \sum_\mu \frac{2|f_\mu|^2}{m - \epsilon_\mu} = \frac{1}{\kappa}$$

で固有値 m が決まる。κ を $\kappa/2$ で置き換えると TDA 方程式 (3.8) になる。m が全て正であるためには

$$\kappa > 0 \,, \quad \text{または} \quad \frac{1}{\kappa} < -\sum_{ph} \frac{2|f_{ph}|^2}{\epsilon_{ph}} = D_{\mathrm{RPA}}(0) \,, \qquad \therefore \qquad \kappa > \frac{1}{D_{\mathrm{RPA}}(0)} \tag{3.55}$$

である。(3.29) で示したように, $\kappa < 1/D_{\mathrm{RPA}}(0)$ のとき, RPA 方程式には純虚数解 $\omega^* = -\omega$ が存在する。この場合, (3.27) より

$$|X_\mu|^2 = \frac{|C f_\mu|^2}{\big(\hbar\omega - \epsilon_\mu\big)\big(\hbar\omega^* - \epsilon_\mu\big)} = \frac{|C f_\mu|^2}{\big(\hbar\omega^* + \epsilon_\mu\big)\big(\hbar\omega + \epsilon_\mu\big)} = |Y_\mu|^2 \,, \qquad \therefore \qquad N = 0$$

である。

問 3.3 分離型相互作用の場合 D_c を C, C_g で表せ。ただし

$$C = \sum_{ph} \Big(f^*_{ph} g_{ph} + f_{ph} g^*_{ph} \Big) \,, \qquad C_g = 2 \sum_{ph} \epsilon_{ph} |g_{ph}|^2$$

である。また, シュワルツの不等式の証明と同様にして $C^2 \leq -D_{\mathrm{RPA}}(0) C_g$ を示せ。以上から $D_c > 0$ になる条件は (3.55) であることを示せ。

3.7 時間依存 HF と微小振動

時間に依存するシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\,\psi(t)\,\rangle = H|\,\psi(t)\,\rangle$$

を変分問題に書き直す。

$$S[\,\psi\,] = \int_{t_1}^{t_2} dt\,L\,, \qquad L = \langle\,\psi(t)\,|\,H - i\hbar\frac{d}{dt}\,|\,\psi(t)\,\rangle$$

とするとき, $|\,\psi(t)\,\rangle$ を任意として, 微小変分 $|\,\delta\psi\,\rangle$ に対して

$$\delta S = S[\,\psi + \delta\psi\,] - S[\,\psi\,] = 0\,, \qquad \text{ただし} \qquad |\,\delta\psi(t_1)\,\rangle = |\,\delta\psi(t_2)\,\rangle = 0$$

を満たす $|\,\psi(t)\,\rangle$ を求めることとシュレディンガー方程式を解くことは同等である。$|\,\psi(t)\,\rangle$ を制限して $\delta S = 0$ を要請すると, シュレディンガー方程式の近似解が求まる。以下では $|\,\psi(t)\,\rangle$ として時間依存のスレーター行列式

$$|\,g(t)\,\rangle = e^{-iE_{\rm HF}t/\hbar}e^{G(t)}|\,\rangle\,, \qquad G(t) = \sum_{ph}\Big(g_{ph}(t)a_p^\dagger a_h - g_{ph}^*(t)a_h^\dagger a_p\Big) \tag{3.56}$$

に制限する。

g は微小であるとして G の 3 次以上を無視すると $\mathcal{E} = \langle\,g\,|\,H\,|\,g\,\rangle = \langle\,|e^{-G}He^{G}|\,\rangle$ は

$$\begin{aligned}\mathcal{E} &= \langle\,|\,H\,|\,\rangle + \langle\,|[\,H\,,\,G\,]|\,\rangle + \frac{1}{2}\langle\,|[\,[\,H\,,\,G\,]\,,\,G\,]|\,\rangle \\ &= E_{\rm HF} + \frac{1}{2}\sum_{\mu\mu'}\Big(g_\mu^* A_{\mu\mu'}g_{\mu'} + g_\mu^* B_{\mu\mu'}g_{\mu'}^* + g_\mu B_{\mu\mu'}^* g_{\mu'} + g_\mu A_{\mu\mu'}^* g_{\mu'}^*\Big)\end{aligned}$$

ただし, 簡単のため $\mu = ph$, $\mu' = p'h'$ で表す。

$$\frac{d}{dt}|\,g\,\rangle = \frac{E_{\rm HF}}{i\hbar}|\,g\,\rangle + e^{-iE_{\rm HF}t/\hbar}\frac{d}{dt}e^{G(t)}|\,\rangle = \frac{E_{\rm HF}}{i\hbar}|\,g\,\rangle + e^{-iE_{\rm HF}t/\hbar}\left(\dot{G} + \frac{\dot{G}G + G\dot{G}}{2}\right)|\,\rangle$$

より

$$\begin{aligned}\langle\,g\,|\frac{d}{dt}\,|\,g\,\rangle &= \frac{E_{\rm HF}}{i\hbar}\langle\,g\,|\,g\,\rangle + \langle\,|\left(1 - G + \frac{G^2}{2}\right)\left(\dot{G} + \frac{\dot{G}G + G\dot{G}}{2}\right)|\,\rangle \\ &= \frac{E_{\rm HF}}{i\hbar} + \langle\,|\left(\dot{G} + \frac{1}{2}[\,\dot{G}\,,\,G\,]\right)|\,\rangle = \frac{E_{\rm HF}}{i\hbar} + \frac{1}{2}\langle\,|[\,\dot{G}\,,\,G\,]|\,\rangle\end{aligned}$$

になる。$\langle\,|[\,a_h^\dagger a_p\,,\,a_{p'}^\dagger a_{h'}\,]|\,\rangle = \delta_{hh'}\,\delta_{pp'}$ より

$$\langle\,|[\,\dot{G}\,,\,G\,]|\,\rangle = \sum\langle\,|[\,\dot{g}_{ph}a_p^\dagger a_h - \dot{g}_{ph}^* a_h^\dagger a_p\,,\,g_{p'h'}a_{p'}^\dagger a_{h'} - g_{p'h'}^* a_{h'}^\dagger a_{p'}\,]|\,\rangle = \sum_\mu\big(\,g_\mu^*\dot{g}_\mu - g_\mu\dot{g}_\mu^*\,\big)$$

したがって

$$L = \langle\,g\,|\,H - i\hbar\frac{d}{dt}\,|\,g\,\rangle = \mathcal{E} - E_{\rm HF} - \frac{i\hbar}{2}\sum_\mu\big(\,g_\mu^*\dot{g}_\mu - g_\mu\dot{g}_\mu^*\,\big)$$

変分をとるとき g^* と g は独立と見なしてよい。

$$\delta L = \sum_\mu\left(\delta g_\mu\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial g_\mu} + \delta g_\mu^*\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial g_\mu^*}\right) - \frac{i\hbar}{2}\sum_\mu\Big(\delta g_\mu^*\,\dot{g}_\mu + g_\mu^*\,\delta\dot{g}_\mu - \delta g_\mu\,\dot{g}_\mu^* - g_\mu\,\delta\dot{g}_\mu^*\Big)\,, \qquad \delta\dot{g}_\mu = \frac{d}{dt}\delta g_\mu$$

時間積分において部分積分すれば $g_\mu^*\,\delta\dot g_\mu \longrightarrow -\,\dot g_\mu^*\,\delta g_\mu$, $g_\mu\,\delta\dot g_\mu^* \longrightarrow -\,\dot g_\mu\,\delta g_\mu^*$ になるから

$$\delta L = \sum_\mu \left(\delta g_\mu \left(\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial g_\mu} + i\hbar\dot g_\mu^* \right) + \delta g_\mu^* \left(\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial g_\mu^*} - i\hbar\dot g_\mu \right) \right)$$

としてよい。$\delta S = 0$ より

$$\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial g_\mu^*} = i\hbar\dot g_\mu\,, \qquad \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial g_\mu} = -\,i\hbar\dot g_\mu^* \tag{3.57}$$

を得る。両式は互いに複素共役であるから, 一方だけ解けばよい。$A_{\mu\mu'}^* = A_{\mu'\mu}$, $B_{\mu\mu'} = B_{\mu'\mu}$ より

$$\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial g_\mu^*} = \frac{1}{2}\sum_{\mu'}\Big(A_{\mu\mu'}g_{\mu'} + B_{\mu\mu'}g_{\mu'}^* + g_{\mu'}^* B_{\mu'\mu} + g_{\mu'}A_{\mu'\mu}^* \Big) = \sum_{\mu'}\Big(A_{\mu\mu'}g_{\mu'} + B_{\mu\mu'}g_{\mu'}^* \Big)$$

したがって

$$\sum_{\mu'}\Big(A_{\mu\mu'}g_{\mu'} + B_{\mu\mu'}g_{\mu'}^* \Big) = i\hbar\,\dot g_\mu \tag{3.58}$$

である。単振動解

$$g_\mu(t) = g_0\Big(X_\mu e^{-i\omega t} + Y_\mu^* e^{i\omega t} \Big)\,, \qquad g_0 = \text{実数} \neq 0$$

を考えると

$$\sum_{\mu'}\Big(A_{\mu\mu'}X_{\mu'} + B_{\mu\mu'}Y_{\mu'} \Big)e^{-i\omega t} + \sum_{\mu'}\Big(A_{\mu\mu'}Y_{\mu'}^* + B_{\mu\mu'}X_{\mu'}^* \Big)e^{i\omega t} = \hbar\omega\Big(X_\mu e^{-i\omega t} - Y_\mu^* e^{i\omega t} \Big)$$

になるから

$$\sum_{\mu'}\Big(A_{\mu\mu'}X_{\mu'} + B_{\mu\mu'}Y_{\mu'} \Big) = \hbar\omega X_\mu\,, \qquad \sum_{\mu'}\Big(A_{\mu\mu'}Y_{\mu'}^* + B_{\mu\mu'}X_{\mu'}^* \Big) = -\,\hbar\omega Y_\mu^*$$

第 2 式の複素共役をとると RPA 方程式

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \hbar\omega\begin{pmatrix} X \\ -\,Y \end{pmatrix}$$

が求まる。

$$G = \sum_{ph}\big(g_{ph}a_p^\dagger a_h - g_{ph}^* a_h^\dagger a_p \big) = g_0\big(O^\dagger e^{-i\omega t} - O e^{i\omega t} \big)\,, \qquad O^\dagger = \sum_{ph}\big(X_{ph}a_p^\dagger a_h - Y_{ph}a_h^\dagger a_p \big)$$

であるから, 時間に依存するスレーター行列式は

$$|\,g\,\rangle = e^{-iE_{\rm HF}t/\hbar}\exp\Big(g_0\big(O^\dagger e^{-i\omega t} - O e^{i\omega t} \big)\Big)|\,\rangle$$

になる。g_0 が微小のとき, $|\,g\,\rangle$ は時間依存のシュレディンガー方程式を近似的に満たす。

$O^\dagger$ が励起状態を生成する演算子であり $\hbar\omega$ が励起エネルギーを与えることは, 上の導出方法では明らかではない。1 次元調和振動子と比較して, これを示す。角振動数 $\varOmega$ の 1 次元調和振動子の生成演算子は

$$c^\dagger = \sqrt{\frac{m\varOmega}{2\hbar}}\left(x - \frac{i}{m\varOmega}p \right)\,, \qquad p = -\,i\hbar\frac{d}{dx}$$

であり

$$\big[\,c\,,\,c^\dagger\,\big] = 1\,, \qquad H = \hbar\varOmega\big(c^\dagger c + 1/2 \big)\,, \qquad p = i\sqrt{\frac{m\hbar\varOmega}{2}}\big(c^\dagger - c \big)$$

になる。初期状態を $\psi(x,0)$ として H の基底状態を平行移動した $\psi(x,0)=\varphi_0(x-x_0)$ とする。

$$\psi(x,0)=\varphi_0(x-x_0)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}(-x_0)^k\frac{d^k}{dx^k}\varphi_0(x)=\exp\!\left(-x_0\frac{d}{dx}\right)\varphi_0(x)=e^{-ix_0p/\hbar}\varphi_0(x)$$

つまり

$$\psi(x,0)=e^{g_0(c^\dagger-c)}\varphi_0(x)\,,\qquad g_0=x_0\sqrt{\frac{m\Omega}{2\hbar}}$$

である。時刻 t では

$$\psi(x,t)=U(t)\psi(x,0)=U(t)e^{g_0(c^\dagger-c)}\varphi_0(x)\,,\qquad U(t)=e^{-iHt/\hbar}\,,\quad UU^\dagger=1$$

になる。

$$Ue^AU^\dagger=\sum_k\frac{1}{k!}UA^kU^\dagger=\sum_k\frac{1}{k!}\big(UAU^\dagger\big)^k=\exp\big(UAU^\dagger\big)\,,\qquad\therefore\qquad Ue^A=\exp\big(UAU^\dagger\big)\,U$$

より $C(t)=UcU^\dagger$ とすると

$$\psi(x,t)=e^{g_0(C^\dagger-C)}U\varphi_0(x)=e^{-iE_0t/\hbar}e^{g_0(C^\dagger-C)}\varphi_0(x)\,,\qquad E_0=\hbar\Omega/2$$

である。$i\hbar\,dU/dt=HU=UH$ より

$$i\hbar\frac{dC}{dt}=i\hbar\frac{dU}{dt}cU^\dagger+Uc\Big(-i\hbar\frac{dU}{dt}\Big)^\dagger=U\big[\,H\,,\,c\,\big]U^\dagger=-\hbar\Omega\,UcU^\dagger=-\hbar\Omega\,C$$

であるから $C(t)=e^{i\Omega t}C(0)=e^{i\Omega t}c$ になる。したがって

$$\psi(x,t)=e^{-iE_0t/\hbar}\exp\Big(g_0\big(c^\dagger e^{-i\Omega t}-c\,e^{i\Omega t}\big)\Big)\varphi_0(x)$$

これは任意の g_0 について正確な結果であり $|g_0|\ll 1$ である必要はない。$|\,g\,\rangle$ と比較すると

$$c^\dagger\longleftrightarrow O^\dagger\,,\qquad E_0\longleftrightarrow E_{\rm HF}\,,\qquad \Omega\longleftrightarrow\omega$$

の対応関係があるから, $O^\dagger$ は励起状態の生成演算子, $\hbar\omega$ は励起エネルギーと解釈できる。ただし, $|\,g\,\rangle$ は微小振動の場合に有効である。

$Q_\mu=\sqrt{\hbar}\,g_\mu$, $P_\mu=i\sqrt{\hbar}\;g_\mu^*$ とすれば, (3.57) は正準方程式

$$\dot Q_\mu=\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial P_\mu}\,,\qquad \dot P_\mu=-\,\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial Q_\mu}$$

になる。時間に依存しない演算子 F の期待値

$$\langle\,F\,\rangle=\langle\,g\,|\,F\,|\,g\,\rangle=\langle\;|e^{-G}Fe^{G}|\;\rangle$$

は $g=g(t)$ により時間に依存する。

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle\,F\,\rangle=\sum_\mu\left(i\hbar\,\dot g_\mu\frac{\partial\langle\,F\,\rangle}{\partial g_\mu}+i\hbar\,\dot g_\mu^*\frac{\partial\langle\,F\,\rangle}{\partial g_\mu^*}\right)=\sum_\mu\left(\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial g_\mu^*}\frac{\partial\langle\,F\,\rangle}{\partial g_\mu}-\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial g_\mu}\frac{\partial\langle\,F\,\rangle}{\partial g_\mu^*}\right)$$

Q_μ, P_μ で表せば

$$\frac{d}{dt}\langle\,F\,\rangle=\sum_\mu\left(\frac{\partial\langle\,F\,\rangle}{\partial Q_\mu}\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial P_\mu}-\frac{\partial\langle\,F\,\rangle}{\partial P_\mu}\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial Q_\mu}\right)=\big[\,\langle\,F\,\rangle\,,\,\mathcal{E}\,\big]_{\rm PB}$$

になる。これは解析力学のポアソン括弧である。$\mathcal{E}$ は保存する。

時間依存 HF は $|\,\rangle$ 近傍の微小振動に限らず適用できる。時間依存のスレーター行列式を (3.56) で表すと G^3 以上を考慮する必要があり, この形式では複雑になる。時間依存のスレーター行列式 $|\,t\,\rangle$ を

$$|\,t\,\rangle = b_1^\dagger(t)\cdots b_N^\dagger(t)|\,\mathrm{vac}\,\rangle$$

とし, $b_\alpha^\dagger(t)$ に対応する 1 粒子波動関数 $\psi_\alpha(\boldsymbol{r},t)$ を求める。$\psi_\alpha(\boldsymbol{r},t)$ は 2 成分スピノールである。(2.4) と同様にすれば

$$\begin{aligned}\mathcal{E} = \langle\,t\,|\,H\,|\,t\,\rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_h\int d^3r\,\psi_h^\dagger(\boldsymbol{r},t)\boldsymbol{\nabla}^2\psi_h(\boldsymbol{r},t)\\ &\quad+\frac{1}{2}\sum_{hh'}\int d^3rd^3r'\psi_h^\dagger(\boldsymbol{r},t)\psi_{h'}^\dagger(\boldsymbol{r}',t)\,\overline{v}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi_h(\boldsymbol{r},t)\psi_{h'}(\boldsymbol{r}',t)\end{aligned}$$

であり

$$\langle\,t\,|\,\frac{\partial}{\partial t}\,|\,t\,\rangle = \sum_h\int d^3r\,\psi_h^\dagger(\boldsymbol{r},t)\frac{\partial}{\partial t}\psi_h(\boldsymbol{r},t)$$

になる。ある 1 つの $\psi_h^\dagger(\boldsymbol{r},t)$ だけ $\psi_h^\dagger(\boldsymbol{r},t)+\delta\psi_h^\dagger(\boldsymbol{r},t)$ に変分すると (ψ と $\psi^\dagger$ は独立と見なす)

$$\begin{aligned}\delta\mathcal{E} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\,\delta\psi_h^\dagger(\boldsymbol{r},t)\boldsymbol{\nabla}^2\psi_h(\boldsymbol{r},t)\\ &\quad+\sum_{h'}\int d^3rd^3r'\delta\psi_h^\dagger(\boldsymbol{r},t)\,\psi_{h'}^\dagger(\boldsymbol{r}',t)\,\overline{v}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi_h(\boldsymbol{r},t)\psi_{h'}(\boldsymbol{r}',t)\end{aligned}$$

になる。(2.5) と同様に, 任意の 1 粒子状態 $|\,\phi_\alpha\,\rangle$ に対して

$$\langle\,\phi_\alpha\,|\,u_{\mathrm{HF}}[\psi]\,|\,\phi_\beta\,\rangle = \sum_h\langle\,\phi_\alpha\,,\psi_h\,|\,\overline{v}\,|\,\phi_\beta\,,\psi_h\,\rangle$$

とすると

$$\delta\mathcal{E} = \langle\,\delta\psi_h|\,h_{\mathrm{HF}}[\psi]\,|\,\psi_h\,\rangle\,,\qquad h_{\mathrm{HF}}[\psi] = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + u_{\mathrm{HF}}[\psi]$$

になるから

$$\delta L = \langle\,\delta\psi_h|\left(h_{\mathrm{HF}}[\psi]-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)|\,\psi_h\,\rangle$$

したがって, 時間依存の HF 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_h(\boldsymbol{r},t) = h_{\mathrm{HF}}[\psi]\,\psi_h(\boldsymbol{r},t) \tag{3.59}$$

を得る。

(3.59) から (3.58) を導く。時間に依存しない HF 方程式

$$h_{\mathrm{HF}}[\varphi]\,\varphi_\alpha(\boldsymbol{r}) = \epsilon_\alpha\varphi_\alpha(\boldsymbol{r})$$

の解 $\varphi_\alpha(\boldsymbol{r})$ を用いて

$$\psi_h(\boldsymbol{r},t) = e^{-i\epsilon_h t/\hbar}\left(\varphi_h(\boldsymbol{r})+\sum_p g_{ph}(t)\varphi_p(\boldsymbol{r})\right) \tag{3.60}$$

とする。$|g_{ph}|\ll 1$ であるとして g_{ph} の 2 次以上を無視する。(3.59) は

$$\epsilon_h\left(\varphi_h(\boldsymbol{r})+\sum_{p'}g_{p'h}\varphi_{p'}(\boldsymbol{r})\right)+i\hbar\sum_{p'}\dot{g}_{p'h}\varphi_{p'}(\boldsymbol{r}) = h_{\mathrm{HF}}[\psi]\left(\varphi_h(\boldsymbol{r})+\sum_{p'}g_{p'h}\varphi_{p'}(\boldsymbol{r})\right)$$

$\varphi_p^\dagger$ をかけ積分すれば

$$\epsilon_h g_{ph} + i\hbar\,\dot{g}_{ph} = \langle\,\varphi_p\,|\,h_{\rm HF}[\psi]\,|\,\varphi_h\,\rangle + \sum_{p'} g_{p'h}\langle\,\varphi_p\,|\,h_{\rm HF}[\varphi]\,|\,\varphi_{p'}\,\rangle = \langle\,\varphi_p\,|\,h_{\rm HF}[\psi]\,|\,\varphi_h\,\rangle + \epsilon_p g_{ph}$$

になる。g の 2 次以上を無視するから, 右辺第 2 項では $\langle\,\varphi_p\,|\,h_{\rm HF}[\psi]\,|\,\varphi_{p'}\,\rangle$ を $\langle\,\varphi_p\,|\,h_{\rm HF}[\varphi]\,|\,\varphi_{p'}\,\rangle$ で置き換えた。

$$\langle\,\varphi_p\,|\,h_{\rm HF}[\psi]\,|\,\varphi_h\,\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\langle\,\varphi_p\,|\,\boldsymbol{\nabla}^2\,|\,\varphi_h\,\rangle + \sum_{h'}\langle\,\varphi_p\,,\psi_{h'}\,|\,\overline{v}\,|\,\varphi_h\,,\psi_{h'}\,\rangle$$

の $\psi_{h'}$ に (3.60) を代入すると

$$\begin{aligned}
\langle\,\varphi_p\,|\,h_{\rm HF}[\psi]\,|\,\varphi_h\,\rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m}\langle\,\varphi_p\,|\,\boldsymbol{\nabla}^2\,|\,\varphi_h\,\rangle + \sum_{h'}\langle\,\varphi_p\,,\varphi_{h'}\,|\,\overline{v}\,|\,\varphi_h\,,\varphi_{h'}\,\rangle \\
&\quad + \sum_{p'h'}\Big(g_{p'h'}\langle\,\varphi_p\,,\varphi_{h'}\,|\,\overline{v}\,|\,\varphi_h\,,\varphi_{p'}\,\rangle + g^*_{p'h'}\langle\,\varphi_p\,,\varphi_{p'}\,|\,\overline{v}\,|\,\varphi_h\,,\varphi_{h'}\,\rangle\Big) \\
&= \langle\,\varphi_p\,|\,h_{\rm HF}[\varphi]\,|\,\varphi_h\,\rangle + \sum_{p'h'}\Big(g_{p'h'}\overline{v}_{ph'\,hp'} + g^*_{p'h'}\overline{v}_{pp'\,hh'}\Big) \\
&= \sum_{p'h'}\Big(g_{p'h'}\overline{v}_{ph'\,hp'} + g^*_{p'h'}\overline{v}_{pp'\,hh'}\Big)
\end{aligned}$$

であるから

$$i\hbar\dot{g}_{ph} = \epsilon_{ph}g_{ph} + \sum_{p'h'}\Big(g_{p'h'}\overline{v}_{ph'\,hp'} + g^*_{p'h'}\overline{v}_{pp'\,hh'}\Big) = \sum_{p'h'}\Big(A_{php'h'}g_{p'h'} + B_{php'h'}g^*_{p'h'}\Big)$$

になり (3.58) が求まる。

3.8 線形応答としての RPA

周期的な時間変化をする一体の外場 (エルミート演算子)

$$g(t) = fe^{-i\omega t} + f^\dagger e^{i\omega t}\,, \qquad f = \text{時間に依存しない演算子}$$

に対する系の応答を求める。ただし, 外場は非常に弱いとして外場について 1 次まで考える (線形応答)。

一粒子状態 $|\alpha(t)\rangle$ の時間発展が, 時間に依存するハートリー・フォック方程式 (time dependent Hartree–Fock equation, TDHF equation)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha(t)\rangle = \Big(h_{\rm HF} + g(t)\Big)|\alpha(t)\rangle$$

に従うとする。密度行列

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{i=1}^{N}\,|\,i(t)\rangle\langle\,i(t)|$$

の時間変化は

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t) &= \sum_{i=1}^{N} i\hbar\frac{\partial|i(t)\rangle}{\partial t}\langle i(t)| + \sum_{i=1}^{N}|i(t)\rangle\, i\hbar\frac{\partial\langle i(t)|}{\partial t} \\
&= \sum_{i=1}^{N}\Big(h_{\rm HF} + g(t)\Big)|i(t)\rangle\langle i(t)| - \sum_{i=1}^{N}|i(t)\rangle\langle i(t)|\Big(h_{\rm HF} + g(t)\Big) \\
&= \Big[\,h_{\rm HF} + g(t)\,,\,\hat{\rho}(t)\,\Big]
\end{aligned} \tag{3.61}$$

である。$g(t)=0$ のときの密度行列を $\hat{\rho}_0$ とする。HF 条件 (2.32) より

$$\Big[\, h_0\,,\,\hat{\rho}_0 \,\Big] = 0\,, \qquad ただし\quad h_0 \equiv h_{\mathrm{HF}}[\hat{\rho}_0] \tag{3.62}$$

である。外場 $g(t)$ が十分小さい場合, $\hat{\rho}(t)$ は $\hat{\rho}_0$ とそれほど変わらないとして

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_0 + \delta\hat{\rho}(t)$$

と展開する。以下では h_0 と $\hat{\rho}_0$ が対角化になる HF 基底

$$\langle\alpha|\, h_0\, |\beta\rangle = \epsilon_\alpha\,\delta_{\alpha\beta}\,, \qquad \langle\alpha|\,\hat{\rho}_0\,|\beta\rangle = \theta_\alpha\,\delta_{\alpha\beta}\,, \quad \theta_\alpha = \begin{cases} 1 & \text{for hole states} \\ 0 & \text{for particle states} \end{cases}$$

で考える。(2.29) で示したように, $\hat{\rho}(t)^2 = \hat{\rho}(t)$ であるから, この基底では $\delta\hat{\rho}$ の ph 成分以外は 0 になる。h_{HF} を $\hat{\rho}=\hat{\rho}_0$ のまわりで展開すると

$$h_{\mathrm{HF}}[\hat{\rho}(t)] = h_0 + \delta h + \cdots \tag{3.63}$$

ただし

$$\delta h = \sum_{\alpha\beta} \frac{\partial h_{\mathrm{HF}}}{\partial\rho_{\alpha\beta}}\bigg|_{\hat{\rho}=\hat{\rho}_0} \delta\rho_{\alpha\beta} = \sum_{p'h'} \left(\frac{\partial h_{\mathrm{HF}}}{\partial\rho_{p'h'}}\bigg|_{\hat{\rho}=\hat{\rho}_0} \delta\rho_{p'h'} + \frac{\partial h_{\mathrm{HF}}}{\partial\rho_{h'p'}}\bigg|_{\hat{\rho}=\hat{\rho}_0} \delta\rho_{h'p'} \right)$$

(3.62), (3.63) から (3.61) は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\delta\hat{\rho} = \Big[\, h_0\,,\,\delta\hat{\rho}\,\Big] + \Big[\,\delta h + g\,,\,\hat{\rho}_0\,\Big]$$

となる。これの ph 成分は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\delta\rho_{ph} = \epsilon_{ph}\,\delta\rho_{ph} + \delta h_{ph} + g_{ph} \tag{3.64}$$

$g(t)$ の時間依存性と同様にして

$$\delta\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_1 \exp(-i\omega t) + \hat{\rho}_1^\dagger \exp(i\omega t)$$

とする。$\hat{\rho}_1$ はエルミートである必要はない。

$$\delta\rho_{\alpha\beta} = \rho_{1\alpha\beta}\exp(-i\omega t) + \rho^*_{1\beta\alpha}\exp(i\omega t)$$

であるから

$$\begin{aligned}\epsilon_{ph}\,\delta\rho_{ph} + \delta h_{ph} &= \sum_{p'h'}\Big(A_{ph\,p'h'}\,\rho_{1p'h'} + B_{ph\,p'h'}\,\rho_{1h'p'}\Big)\exp(-i\omega t) \\ &\quad + \sum_{p'h'}\big(A_{ph\,p'h'}\,\rho^*_{1h'p'} + B_{ph\,p'h'}\,\rho^*_{1p'h'}\big)\exp(i\omega t)\end{aligned}$$

ただし

$$A_{ph\,p'h'} = \epsilon_{ph}\,\delta_{pp'}\,\delta_{hh'} + \frac{\partial (h_{\mathrm{HF}})_{ph}}{\partial\rho_{p'h'}}\bigg|_{\hat{\rho}=\hat{\rho}_0}\,, \qquad B_{ph\,p'h'} = \frac{\partial (h_{\mathrm{HF}})_{ph}}{\partial\rho_{h'p'}}\bigg|_{\hat{\rho}=\hat{\rho}_0} \tag{3.65}$$

である。(3.64) において $\exp(\pm i\omega t)$ の係数は両辺で一致すべきであるから

$$\begin{aligned}\hbar\omega\,\rho_{1ph} &= \sum_{p'h'}\Big(A_{ph\,p'h'}\,\rho_{1p'h'} + B_{ph\,p'h'}\,\rho_{1h'p'}\Big) + f_{ph} \\ -\hbar\omega\,\rho^*_{1hp} &= \sum_{p'h'}\Big(A_{ph\,p'h'}\,\rho^*_{1h'p'} + B_{ph\,p'h'}\,\rho^*_{1p'h'}\Big) + f^*_{hp}\end{aligned}$$

つまり

$$\left[\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} - \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right] \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \overline{\rho}_1 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} f \\ \overline{f} \end{pmatrix} \tag{3.66}$$

である。

外場が無限小の極限では

$$\left[\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} - \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right] \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \overline{\rho}_1 \end{pmatrix} = 0$$

となる。この方程式の解は一般に $\rho_1 = \overline{\rho}_1 = 0$ になり, 系は何の応答もしない。ところが, ω が RPA 方程式の固有振動数 ω_λ に等しい場合, $\rho_1 = X^\lambda$, $\overline{\rho}_1 = Y^\lambda$ という 0 でない解が存在する。つまり, $\omega = \omega_\lambda$ である無限小の外場に対して系は共鳴する。RPA とは微小振動という近似のもとで系の固有振動を求めることである。

ここで行った RPA 方程式の導出は前に導いた方法よりも一般的である。

$$(h_{\rm HF})_{\alpha\beta} = \frac{\partial E_{\rm HF}}{\partial \rho_{\beta\alpha}}$$

であるから

$$\widetilde{v}_{\alpha\alpha'\,\beta\beta'} = \left.\frac{\partial (h_{\rm HF})_{\alpha\beta}}{\partial \rho_{\beta'\alpha'}}\right|_{\hat\rho=\hat\rho_0} = \left.\frac{\partial^2 E_{\rm HF}}{\partial \rho_{\beta\alpha}\,\partial \rho_{\beta'\alpha'}}\right|_{\hat\rho=\hat\rho_0} \tag{3.67}$$

とすると, (3.65) で与えられる A, B は

$$A_{ph,\,p'h'} = \epsilon_{ph}\,\delta_{pp'}\,\delta_{hh'} + \widetilde{v}_{ph'\,hp'}\,, \quad B_{ph\,p'h'} = \widetilde{v}_{pp'\,hh'}$$

となる。$\overline{v}$ が $\hat\rho$ に依存しないならば (2.27) から $\widetilde{v}_{\alpha\alpha'\,\beta\beta'} = \overline{v}_{\alpha\alpha'\,\beta\beta'}$ となり, A と B は (3.22), (3.24) に一致する。一方, $\overline{v}$ が $\hat\rho$ に依存する場合 $\widetilde{v}_{\alpha\alpha'\,\beta\beta'} \neq \overline{v}_{\alpha\alpha'\,\beta\beta'}$ であり, RPA 方程式においては $\overline{v}$ ではなく $\widetilde{v}$ を用いなければならない。

(3.66) の解 ρ_1 を RPA の固有値 ω_λ と固有ベクトル X^λ, Y^λ で表す。$R_{\alpha\beta,\,\alpha'\beta'}(\omega)$ を

$$R_{\alpha\beta,\,\alpha'\beta'}(\omega) = \sum_\lambda \left(\frac{\langle 0\,|a^\dagger_\beta a_\alpha|\lambda\rangle\langle\lambda|a^\dagger_{\alpha'} a_{\beta'}|\,0\,\rangle}{\hbar\omega - \hbar\omega_\lambda + i\varepsilon} - \frac{\langle 0\,|a^\dagger_{\alpha'} a_{\beta'}|\lambda\rangle\langle\lambda|a^\dagger_\beta a_\alpha|\,0\,\rangle}{\hbar\omega + \hbar\omega_\lambda + i\varepsilon} \right), \quad \varepsilon \to +0 \tag{3.68}$$

で定義する。ただし, 添字 $\alpha\beta$, $\alpha'\beta'$ は ph または hp である。分母の微小量 $i\varepsilon$ は $\omega = \pm\omega_\lambda$ での処理を規定するが, このように取る理由は時間に依存する摂動で述べる。

$$g_{\alpha\beta} = \sum_{\alpha'\beta'} R_{\alpha\beta,\,\alpha'\beta'}(\omega) f_{\alpha'\beta'} = \sum_{p'h'} \Big(R_{\alpha\beta,\,p'h'}(\omega) f_{p'h'} + R_{\alpha\beta,\,h'p'}(\omega) f_{h'p'} \Big)$$

とすると, (3.25) から

$$\begin{aligned} g_{ph} &= \sum_\lambda \frac{X^\lambda_{ph}}{\hbar\omega - \hbar\omega_\lambda + i\varepsilon} \sum_{p'h'} \big(X^{\lambda\,*}_{p'h'} f_{p'h'} + Y^{\lambda\,*}_{p'h'} f_{h'p'} \big) \\ &\quad - \sum_\lambda \frac{Y^{\lambda\,*}_{ph}}{\hbar\omega + \hbar\omega_\lambda + i\varepsilon} \sum_{p'h'} \big(Y^\lambda_{p'h'} f_{p'h'} + X^\lambda_{p'h'} f_{h'p'} \big) \\ &= \sum_\lambda \left(\frac{Z_{1\lambda}}{\hbar\omega - \hbar\omega_\lambda + i\varepsilon} X^\lambda_{ph} - \frac{Z_{2\lambda}}{\hbar\omega + \hbar\omega_\lambda + i\varepsilon} Y^{\lambda\,*}_{ph} \right) \end{aligned} \tag{3.69}$$

である。ただし

$$Z_{1\lambda}=\sum_{ph}\Big(X_{ph}^{\lambda\,*}f_{ph}+Y_{ph}^{\lambda\,*}f_{hp}\Big)=\begin{pmatrix}X^{\lambda\,*} & Y^{\lambda\,*}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}f\\ \overline{f}\end{pmatrix}$$

$$Z_{2\lambda}=\sum_{ph}\Big(Y_{ph}^{\lambda}f_{ph}+X_{ph}^{\lambda}f_{hp}\Big)=\begin{pmatrix}Y^{\lambda} & X^{\lambda}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}f\\ \overline{f}\end{pmatrix}$$

同様にして

$$g_{hp}=\sum_{\lambda}\left(\frac{Z_{1\lambda}}{\hbar\omega-\hbar\omega_\lambda+i\varepsilon}Y_{ph}^{\lambda}-\frac{Z_{2\lambda}}{\hbar\omega+\hbar\omega_\lambda+i\varepsilon}X_{ph}^{\lambda\,*}\right)$$

まとめると

$$\begin{pmatrix}g\\ \overline{g}\end{pmatrix}=\sum_{\lambda}\left(\frac{Z_{1\lambda}}{\hbar\omega-\hbar\omega_\lambda+i\varepsilon}\begin{pmatrix}X^{\lambda}\\ Y^{\lambda}\end{pmatrix}-\frac{Z_{2\lambda}}{\hbar\omega+\hbar\omega_\lambda+i\varepsilon}\begin{pmatrix}Y^{\lambda*}\\ X^{\lambda*}\end{pmatrix}\right)$$

である。RPA 方程式より

$$M=\begin{pmatrix}A & B\\ B^* & A^*\end{pmatrix}-\hbar\omega\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

とおくと

$$M\begin{pmatrix}X^{\lambda}\\ Y^{\lambda}\end{pmatrix}=(\hbar\omega_\lambda-\hbar\omega)\begin{pmatrix}X^{\lambda}\\ -Y^{\lambda}\end{pmatrix},\qquad M\begin{pmatrix}Y^{\lambda*}\\ X^{\lambda*}\end{pmatrix}=-\,(\hbar\omega_\lambda+\hbar\omega)\begin{pmatrix}Y^{\lambda*}\\ -X^{\lambda*}\end{pmatrix}$$

であるから

$$\begin{aligned}M\begin{pmatrix}g\\ \overline{g}\end{pmatrix}&=\sum_{\lambda}\left(\frac{Z_{1\lambda}}{\hbar\omega-\hbar\omega_\lambda+i\varepsilon}M\begin{pmatrix}X^{\lambda}\\ Y^{\lambda}\end{pmatrix}-\frac{Z_{2\lambda}}{\hbar\omega+\hbar\omega_\lambda+i\varepsilon}M\begin{pmatrix}Y^{\lambda*}\\ X^{\lambda*}\end{pmatrix}\right)\\ &=-\sum_{\lambda}\left[\begin{pmatrix}X^{\lambda}\\ -Y^{\lambda}\end{pmatrix}Z_{1\lambda}-\begin{pmatrix}Y^{\lambda*}\\ -X^{\lambda*}\end{pmatrix}Z_{2\lambda}\right]\\ &=-\sum_{\lambda}\left[\begin{pmatrix}X^{\lambda}\\ -Y^{\lambda}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}X^{\lambda\,*} & Y^{\lambda\,*}\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}Y^{\lambda*}\\ -X^{\lambda*}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}Y^{\lambda} & X^{\lambda}\end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix}f\\ \overline{f}\end{pmatrix}=-\begin{pmatrix}f\\ \overline{f}\end{pmatrix}\end{aligned}$$

ただし, 最後で完備性 (3.53) を使った。したがって, (3.66) の解 ρ_1 は

$$\rho_{1\alpha\beta}=g_{\alpha\beta}=\sum_{\alpha'\beta'}R_{\alpha\beta,\,\alpha'\beta'}(\omega)f_{\alpha'\beta'}$$

で与えられる。これを ω_λ と X^λ, Y^λ で具体的に表すと, 例えば (3.69) になる。

(3.68) で定義した R は, 一般に時間に依存する摂動論から導出できる。系のハミルトニアンが $H+V(t)$, ただし

$$V(t)=e^{\varepsilon t}\Big(F\exp(\,-\,i\omega t)+F^{\dagger}\exp(i\omega t)\Big),\quad F=\sum_{\alpha\beta}f_{\alpha\beta}\,a_\alpha^{\dagger}a_\beta$$

で与えられるとする。時刻 $t=\,-\infty$ で系が $H|\,0\,\rangle=E_0|\,0\,\rangle$ である固有状態 $|\,0\,\rangle$ にあるとき, 時刻 t における状態 $|\varphi(t)\rangle$ を求める。$t=-\infty$ のとき H の固有状態であるためには $t=-\infty$ では外場は 0 でなければならない。そこで断熱因子 $e^{\varepsilon t}$, ($\varepsilon\to+0$) を導入した。t が有限では $e^{\varepsilon t}=1$ であり何の変更もないが, $t=-\infty$ では $e^{\varepsilon t}\to 0$ であるから $V\to 0$ になる。

$$|\varphi(t)\rangle=e^{-iHt/\hbar}\,|\phi(t)\rangle$$

とし, 時間に依存するシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\varphi(t)\rangle=\Big(H+V(t)\Big)|\varphi(t)\rangle$$

に代入すると

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\phi(t)\rangle=V_{\rm I}(t)|\phi(t)\rangle\,,\qquad V_{\rm I}(t)=e^{iHt/\hbar}V(t)e^{-iHt/\hbar}$$

である。$t=-\infty$ では $|\phi(t)\rangle=|\,0\,\rangle$ であるから, 上式を形式的に積分すると

$$|\phi(t)\rangle=|\,0\,\rangle+\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt_1\,V_{\rm I}(t_1)|\phi(t_1)\rangle$$

右辺の $|\phi(t_1)\rangle$ に上式全体を代入すると

$$|\phi(t)\rangle=|\,0\,\rangle+\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt_1\,V_{\rm I}(t_1)|\,0\,\rangle+\frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{-\infty}^{t}dt_1\int_{-\infty}^{t_1}dt_2\;V_{\rm I}(t_1)V_{\rm I}(t_2)|\phi(t_2)\rangle$$

この操作を繰り返せば

$$|\phi(t)\rangle=\Big(1+U(t)\Big)|\,0\,\rangle$$

ただし

$$U(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt_1\,V_{\rm I}(t_1)+\cdots+\frac{1}{(i\hbar)^n}\int_{-\infty}^{t}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{t_{n-1}}dt_n\;V_{\rm I}(t_1)\cdots V_{\rm I}(t_n)+\cdots$$

になり摂動 V についての展開式を得る。1 次の摂動では

$$\begin{aligned}U(t)|\,0\,\rangle&=\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt_1\,e^{iHt_1/\hbar}V(t_1)e^{-iHt_1/\hbar}|\,0\,\rangle\\&=\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt_1\,e^{i(H-E_0-i\varepsilon)t_1/\hbar}\Big(F\exp(-i\omega t_1)+F^\dagger\exp(i\omega t_1)\Big)|\,0\,\rangle\\&=e^{i(H-E_0)t/\hbar}\left(\frac{e^{-i\omega t}}{\hbar\omega-(H-E_0)+i\varepsilon}F-\frac{e^{i\omega t}}{\hbar\omega+H-E_0-i\varepsilon}F^\dagger\right)|\,0\,\rangle\end{aligned}$$

であるから

$$|\varphi(t)\rangle=e^{-iHt/\hbar}\Big(1+U(t)\Big)|\,0\,\rangle=e^{-iE_0t/\hbar}\Big(1+W(t)\Big)|\,0\,\rangle$$

ただし

$$W(t)=\frac{e^{-i\omega t}}{\hbar\omega-(H-E_0)+i\varepsilon}F-\frac{e^{i\omega t}}{\hbar\omega+(H-E_0)-i\varepsilon}F^\dagger$$

になる。密度行列は

$$\begin{aligned}\langle\varphi(t)|a_\beta^\dagger a_\alpha|\varphi(t)\rangle&=\langle\,0\,|a_\beta^\dagger a_\alpha|\,0\,\rangle+\langle\,0\,|\Big(a_\beta^\dagger a_\alpha W+W^\dagger a_\beta^\dagger a_\alpha\Big)|\,0\,\rangle\\&=\langle\,0\,|a_\beta^\dagger a_\alpha|\,0\,\rangle+\rho_{1\alpha\beta}e^{-i\omega t}+\rho_{1\beta\alpha}^{*}e^{i\omega t}\end{aligned}$$

ただし

$$\rho_{1\alpha\beta}=\langle\,0\,|\left(a_\beta^\dagger a_\alpha\frac{1}{\hbar\omega-(H-E_0)+i\varepsilon}F-F\frac{1}{\hbar\omega+(H-E_0)+i\varepsilon}a_\beta^\dagger a_\alpha\right)|\,0\,\rangle$$

である。

$$\begin{aligned}R_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'}(\omega)=\langle\,0\,|\bigg(&a_\beta^\dagger a_\alpha\frac{1}{\hbar\omega-(H-E_0)+i\varepsilon}a_{\alpha'}^\dagger a_{\beta'}\\&-a_{\alpha'}^\dagger a_{\beta'}\frac{1}{\hbar\omega+(H-E_0)+i\varepsilon}a_\beta^\dagger a_\alpha\bigg)|\,0\,\rangle\end{aligned}\tag{3.70}$$

とすると

$$\rho_{1\alpha\beta} = \sum_{\alpha'\beta'} R_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'}(\omega) f_{\alpha'\beta'} \tag{3.71}$$

と表せる。$R_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'}(\omega)$ を**応答関数** (response function) という。

H の固有状態 $|\,n\,\rangle$, ($H|\,n\,\rangle = (E_0 + \hbar\omega_n)|\,n\,\rangle$) で展開すると (3.70) は

$$R_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'}(\omega) = \frac{1}{\hbar}\sum_n \left(\frac{\langle\,0\,|a_\beta^\dagger a_\alpha|\,n\,\rangle\langle\,n\,|a_{\alpha'}^\dagger a_{\beta'}|\,0\,\rangle}{\omega - \omega_n + i\varepsilon} - \frac{\langle\,0\,|a_{\alpha'}^\dagger a_{\beta'}|\,n\,\rangle\langle\,n\,|a_\beta^\dagger a_\alpha|\,0\,\rangle}{\omega + \omega_n + i\varepsilon} \right) \tag{3.72}$$

になる。$n = 0$ については, 第 1 項と第 2 項がキャンセルするから寄与しない。RPA で定義した (3.68) は, H の固有状態を RPA の固有状態で近似した応答関数である。

HF の応答関数は (3.70) において, 基底状態を HF 真空 $|\,\rangle$ とし

$$H = \sum_\alpha \epsilon_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha$$

としたものである。(3.72) は

$$R^0_{\alpha\beta,\,\alpha'\beta'}(\omega) = \sum_{ph}\left(\frac{\langle\,|a_\beta^\dagger a_\alpha|ph^{-1}\rangle\langle ph^{-1}|a_{\alpha'}^\dagger a_{\beta'}|\,\rangle}{\hbar\omega - \epsilon_{ph} + i\varepsilon} - \frac{\langle\,|a_{\alpha'}^\dagger a_{\beta'}|ph^{-1}\rangle\langle ph^{-1}|a_\beta^\dagger a_\alpha|\,\rangle}{\hbar\omega + \epsilon_{ph} + i\varepsilon} \right)$$

ただし $|ph^{-1}\rangle = a_p^\dagger a_h|\,\rangle$ である。$\langle\,|a_\beta^\dagger a_\alpha|ph^{-1}\rangle = \delta_{\alpha p}\,\delta_{\beta h}$ より

$$\begin{aligned} R^0_{\alpha\beta,\,\alpha'\beta'}(\omega) &= \delta_{\alpha\alpha'}\,\delta_{\beta\beta'}\sum_{ph}\left(\frac{\delta_{\alpha p}\,\delta_{\beta h}}{\hbar\omega - \epsilon_{ph} + i\varepsilon} - \frac{\delta_{\alpha h}\,\delta_{\beta p}}{\hbar\omega + \epsilon_{ph} + i\varepsilon} \right) \\ &= \frac{\delta_{\alpha\alpha'}\,\delta_{\beta\beta'}}{\hbar\omega - \epsilon_{\alpha\beta} + i\varepsilon}\Big((1-\theta_\alpha)\theta_\beta - \theta_\alpha(1-\theta_\beta) \Big) \\ &= \frac{\delta_{\alpha\alpha'}\,\delta_{\beta\beta'}}{\hbar\omega - \epsilon_{\alpha\beta} + i\varepsilon}\Big(\theta_\beta - \theta_\alpha \Big) \end{aligned} \tag{3.73}$$

と簡単な構造をしている。

実験との比較において, 遷移確率の分布を表す

$$S_f(\omega) = \sum_n |\langle\,n\,|F|\,0\,\rangle|^2\,\delta(\hbar\omega - \hbar\omega_n) = \frac{1}{\hbar}\sum_n |\langle\,n\,|F|\,0\,\rangle|^2\,\delta(\omega - \omega_n)\,, \quad \omega > 0$$

がよく登場する。ここで $|\,0\,\rangle$ は基底状態である。

$$\begin{aligned} R_f(\omega) = f^* R f = \sum f^*_{\alpha\beta}\,R_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'}(\omega)\,f_{\alpha'\beta'} &= \frac{1}{\hbar}\sum_n \left(\frac{\langle\,0\,|F^\dagger|\,n\,\rangle\langle\,n\,|F|\,0\,\rangle}{\omega - \omega_n + i\varepsilon} - \frac{\langle\,0\,|F|\,n\,\rangle\langle\,n\,|F^\dagger|\,0\,\rangle}{\omega + \omega_n + i\varepsilon} \right) \\ &= \frac{1}{\hbar}\sum_n \left(\frac{|\langle\,n\,|F|\,0\,\rangle|^2}{\omega - \omega_n + i\varepsilon} - \frac{\big|\langle\,n\,|F^\dagger|\,0\,\rangle\big|^2}{\omega + \omega_n + i\varepsilon} \right) \end{aligned} \tag{3.74}$$

とすると, $\varepsilon \to +0$ のとき

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mathrm{P}\frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x)$$

であるから

$$\mathrm{Im}\,R_f(\omega) = -\frac{\pi}{\hbar}\sum_n \Big(|\langle\,n\,|F|\,0\,\rangle|^2\,\delta(\omega - \omega_n) - \big|\langle\,n\,|F^\dagger|\,0\,\rangle\big|^2\,\delta(\omega + \omega_n) \Big)$$

$|\,0\,\rangle$ が基底状態のとき $\omega > 0$ ならば $\omega + \omega_n > 0$ になり $\delta(\omega + \omega_n) = 0$ である。したがって

$$S_f(\omega) = \sum_n |\langle\,n\,|F|\,0\,\rangle|^2\,\delta(\hbar\omega - \hbar\omega_n) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,R_f(\omega) \tag{3.75}$$

である。

3.9 ベーテ・サルピーター方程式

HF 近似での応答関数と RPA での応答関数の関係について考える。RPA 方程式及び (3.25) から

$$
\begin{aligned}
\hbar\omega_\lambda X^\lambda_{ph} &= \sum_{p'h'} \left(A_{ph\,p'h'} X^\lambda_{p'h'} + B_{ph\,p'h'} Y^\lambda_{p'h'} \right) \\
&= \epsilon_{ph} X^\lambda_{ph} + \sum_{p'h'} \left(\widetilde{v}_{ph'\,hp'} X^\lambda_{p'h'} + \widetilde{v}_{pp'\,hh'} Y^\lambda_{p'h'} \right) \\
&= \epsilon_{ph} X^\lambda_{ph} + \sum_{p'h'} \left(\widetilde{v}_{ph'\,hp'} \langle\, 0\,| a^\dagger_{h'} a_{p'} |\lambda\rangle + \widetilde{v}_{pp'\,hh'} \langle\, 0\,| a^\dagger_{p'} a_{h'} |\lambda\rangle \right)
\end{aligned}
$$

RPA では $\langle\, 0\,| a^\dagger_p a_{p'} |\lambda\rangle = \langle\, 0\,| a^\dagger_h a_{h'} |\lambda\rangle = 0$ であるから

$$
\hbar\omega_\lambda X^\lambda_{ph} = \epsilon_{ph} X^\lambda_{ph} + \langle\, 0\,| \sum_{\alpha'\beta'} \widetilde{v}_{p\alpha'\,h\beta'} a^\dagger_{\alpha'} a_{\beta'} |\lambda\rangle
$$

したがって

$$
\langle\, 0\,| \sum_{\alpha'\beta'} \widetilde{v}_{p\alpha'\,h\beta'} a^\dagger_{\alpha'} a_{\beta'} |\lambda\rangle = (\hbar\omega_\lambda - \epsilon_{ph}) \langle\, 0\,| a^\dagger_h a_p |\lambda\rangle
$$

同様にして $B^* X^\lambda + A^* Y^\lambda = -\hbar\omega_\lambda Y^\lambda$ より

$$
-\langle\, 0\,| \sum_{\alpha'\beta'} \widetilde{v}_{h\alpha'\,p\beta'} a^\dagger_{\alpha'} a_{\beta'} |\lambda\rangle = (\hbar\omega_\lambda - \epsilon_{ph}) \langle\, 0\,| a^\dagger_p a_h |\lambda\rangle
$$

上の 2 式をまとめれば

$$
(\theta_\beta - \theta_\alpha) \langle\, 0\,| \sum_{\alpha'\beta'} \widetilde{v}_{\alpha\alpha'\,\beta\beta'} a^\dagger_{\alpha'} a_{\beta'} |\lambda\rangle = (\hbar\omega_\lambda - \epsilon_{\alpha\beta}) \langle\, 0\,| a^\dagger_\beta a_\alpha |\lambda\rangle
$$

となる。これの複素共役をとり添字を入れ換えれば

$$
(\theta_\beta - \theta_\alpha) \langle\lambda| \sum_{\alpha'\beta'} \widetilde{v}_{\alpha\alpha'\,\beta\beta'} a^\dagger_{\alpha'} a_{\beta'} |\, 0\,\rangle = -(\hbar\omega_\lambda + \epsilon_{\alpha\beta}) \langle\lambda| a^\dagger_\beta a_\alpha |\, 0\,\rangle
$$

である。したがって, (3.68) と (3.73) より

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\substack{\mu\nu \\ \mu'\nu'}} R^0_{\alpha\beta\,\mu\nu} \widetilde{v}_{\mu\nu'\,\nu\mu'} R_{\mu'\nu'\,\alpha'\beta'} \\
&= \frac{\theta_\beta - \theta_\alpha}{\hbar\omega - \epsilon_{\alpha\beta} + i\varepsilon} \sum_{\substack{\mu'\nu' \\ \lambda}} \widetilde{v}_{\alpha\nu'\,\beta\mu'} \left(\frac{\langle\, 0\,| a^\dagger_{\nu'} a_{\mu'} |\lambda\rangle \langle\lambda| a^\dagger_{\alpha'} a_{\beta'} |\, 0\,\rangle}{\hbar\omega - \hbar\omega_\lambda + i\varepsilon} - \frac{\langle\, 0\,| a^\dagger_{\alpha'} a_{\beta'} |\lambda\rangle \langle\lambda| a^\dagger_{\nu'} a_{\mu'} |\, 0\,\rangle}{\hbar\omega + \hbar\omega_\lambda + i\varepsilon} \right) \\
&= \frac{1}{\hbar\omega - \epsilon_{\alpha\beta} + i\varepsilon} \sum_\lambda \left(\langle\, 0\,| a^\dagger_\beta a_\alpha |\lambda\rangle \langle\lambda| a^\dagger_{\alpha'} a_{\beta'} |\, 0\,\rangle \frac{\hbar\omega_\lambda - \epsilon_{\alpha\beta}}{\hbar\omega - \hbar\omega_\lambda + i\varepsilon} \right. \\
&\qquad\qquad \left. + \langle\, 0\,| a^\dagger_{\alpha'} a_{\beta'} |\lambda\rangle \langle\lambda| a^\dagger_\beta a_\alpha |\, 0\,\rangle \frac{\hbar\omega_\lambda + \epsilon_{\alpha\beta}}{\hbar\omega + \hbar\omega_\lambda + i\varepsilon} \right) \\
&= \sum_\lambda \left[\langle\, 0\,| a^\dagger_\beta a_\alpha |\lambda\rangle \langle\lambda| a^\dagger_{\alpha'} a_{\beta'} |\, 0\,\rangle \left(\frac{1}{\hbar\omega - \hbar\omega_\lambda + i\varepsilon} - \frac{1}{\hbar\omega - \epsilon_{\alpha\beta} + i\varepsilon} \right) \right. \\
&\qquad \left. - \langle\, 0\,| a^\dagger_{\alpha'} a_{\beta'} |\lambda\rangle \langle\lambda| a^\dagger_\beta a_\alpha |\, 0\,\rangle \left(\frac{1}{\hbar\omega + \hbar\omega_\lambda + i\varepsilon} - \frac{1}{\hbar\omega - \epsilon_{\alpha\beta} + i\varepsilon} \right) \right] \\
&= R_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'} - \frac{S_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'}}{\hbar\omega - \epsilon_{\alpha\beta} + i\varepsilon}
\end{aligned}
$$

ただし

$$S_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'} = \sum_\lambda \Big(\langle\, 0\,|a^\dagger_\beta a_\alpha|\lambda\rangle\langle\lambda|a^\dagger_{\alpha'} a_{\beta'}|\,0\,\rangle - \langle\, 0\,|a^\dagger_{\alpha'} a_{\beta'}|\lambda\rangle\langle\lambda|a^\dagger_\beta a_\alpha|\,0\,\rangle \Big)$$

完備性 (3.53) より

$$S_{ph\,p'h'} = \sum_\lambda \left(X^\lambda_{ph} X^{\lambda\,*}_{p'h'} - Y^{\lambda\,*}_{ph} Y^\lambda_{p'h'} \right) = \delta_{pp'}\,\delta_{hh'}\,, \quad S_{ph\,h'p'} = \sum_\lambda \left(X^\lambda_{ph} Y^{\lambda\,*}_{p'h'} - Y^{\lambda\,*}_{ph} X^\lambda_{p'h'} \right) = 0$$

であり, S の定義から $S^*_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'} = -S_{\beta\alpha\,\beta'\alpha'}$ となるから $S_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'} = \delta_{\alpha\alpha'}\,\delta_{\beta\beta'}(\theta_\beta - \theta_\alpha)$ である。これから

$$\frac{S_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'}}{\hbar\omega - \epsilon_{\alpha\beta} + i\varepsilon} = R^0_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'}$$

結局, R は

$$R_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'} = R^0_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'} + \sum_{\substack{\mu\nu\\ \mu'\nu'}} R^0_{\alpha\beta\,\mu\nu}\widetilde{v}_{\mu\nu'\,\nu\mu'} R_{\mu'\nu'\,\alpha'\beta'} \tag{3.76}$$

を満たす。この方程式を**ベーテ・サルピーター方程式** (Bethe–Salpeter equation) という。これを使えば RPA 方程式の解を求めずに R を決定できる。

$\tilde{V}_{\mu\nu\,\mu'\nu'} = \widetilde{v}_{\mu\nu'\,\nu\mu'}$ とすると (3.76) は形式的には

$$R = R^0 + R^0\tilde{V}R = \left(1 - R^0\tilde{V}\right)^{-1} R^0$$

である。ここで R^0, R, $\tilde{V}$ は行列である。RPA の固有値は R の極であるから

$$\det\left(1 - R^0(\omega)\tilde{V}\right) = 0$$

から求まる。なお

$$R = R^0 + R^0\tilde{V}R = R^0 + R^0\tilde{V}R^0 + R^0\tilde{V}R^0\tilde{V}R^0 + \cdots \tag{3.77}$$

であり, $\tilde{V}$ についての摂動展開を得る。

簡単な模型　以前と同様に

$$\widetilde{v}_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'} = \kappa f_{\alpha\alpha'} f_{\beta\beta'}$$

の場合, ベーテ・サルピーター方程式を解いて RPA の励起エネルギーを求める。この場合 $R_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'}$ を直接扱わずに

$$R^0_f(\omega) = \sum_{\substack{\alpha\beta\\ \alpha'\beta'}} f^*_{\alpha\beta}\; R^0_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'}(\omega)\; f_{\alpha'\beta'}\,, \qquad R_f(\omega) = \sum_{\substack{\alpha\beta\\ \alpha'\beta'}} f^*_{\alpha\beta}\, R_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'}(\omega)\, f_{\alpha'\beta'}$$

を考えると扱いが簡単になる。ベーテ・サルピーター方程式より

$$R_f(\omega) = R^0_f(\omega) + \kappa\, R^0_f(\omega) R_f(\omega) = \frac{R^0_f(\omega)}{1 - \kappa\, R^0_f(\omega)}$$

である。(3.73) から

$$R^0_f(\omega) = \sum_{\alpha\beta} |f_{\alpha\beta}|^2\, \frac{\theta_\beta - \theta_\alpha}{\hbar\omega - \epsilon_{\alpha\beta} + i\varepsilon} = \sum_{ph} |f_{ph}|^2 \left(\frac{1}{\hbar\omega - \epsilon_{ph} + i\varepsilon} - \frac{1}{\hbar\omega + \epsilon_{ph} + i\varepsilon} \right) \tag{3.78}$$

$\hbar\omega \neq \pm\,\epsilon_{ph}$ ならば $\varepsilon = 0$ としてよいから

$$R^0_f(\omega) = \sum_{ph} \frac{2\epsilon_{ph}\,|f_{ph}|^2}{(\hbar\omega)^2 - \epsilon^2_{ph}}$$

RPA 方程式の固有値は $1 - \kappa\, R_f^0(\omega) = 0$ で決まる。これは (3.28) である。RPA 応答関数の定義 (3.68) より

$$R_f(\omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\lambda'>0} \left(\frac{|\langle \lambda'|F|\,0\,\rangle|^2}{\omega - \omega_{\lambda'} + i\varepsilon} - \frac{|\langle \lambda'|F|\,0\,\rangle|^2}{\omega + \omega_{\lambda'} + i\varepsilon} \right)$$

となるから

$$\lim_{\omega\to\omega_\lambda} (\hbar\omega - \hbar\omega_\lambda)\, R_f(\omega) = |\langle \lambda|F|\,0\,\rangle|^2$$

$1 - \kappa R_f^0(\omega_\lambda) = 0$ を満たす $\omega = \omega_\lambda$ の近傍では

$$1 - \kappa\, R_f^0(\omega) = -\kappa \frac{dR_f^0(\omega_\lambda)}{d\omega_\lambda}\,(\omega - \omega_\lambda) + \cdots$$

と展開できる。したがって

$$|\langle \lambda|F|\,0\,\rangle|^2 = \lim_{\omega\to\omega_\lambda} \frac{(\hbar\omega - \hbar\omega_\lambda)\, R_f^0(\omega)}{-\kappa \dfrac{dR_f^0(\omega_\lambda)}{d\omega_\lambda}\,(\omega - \omega_\lambda) + \cdots} = -\frac{1}{\kappa^2 \dfrac{dR_f^0(\omega_\lambda)}{d\,\hbar\omega_\lambda}}$$

である。これは (3.54) である。

3.10 Sum Rule

F をエルミート演算子とするとき energy weighted sum

$$S = \sum_n \hbar\omega_n\, |\langle\, n\,|F|\,0\,\rangle|^2 = \sum_n \hbar\omega_n\, \langle\, 0\,|F|\,n\,\rangle\langle\, n\,|F|\,0\,\rangle$$

を考える。ただし $|\,0\rangle$, $|\,n\,\rangle$ は H の正確な基底状態, 励起状態とする:

$$H|\,0\,\rangle = E_0\,|\,0\,\rangle\,, \qquad H|\,n\,\rangle = (E_0 + \hbar\omega_n)\,|\,n\,\rangle$$

である。

$$\langle\, n\,|[\,H\,,\,F\,]|\,0\,\rangle = \langle\, n\,|\,(HF - FH)\,|\,0\,\rangle = (E_0 + \hbar\omega_n - E_0)\,\langle\, n\,|F|\,0\,\rangle = \hbar\omega_n\,\langle\, n\,|F|\,0\,\rangle$$

であるから

$$S = \sum_n \langle\, 0\,|F|\,n\,\rangle\langle\, n\,|[\,H\,,\,F\,]|\,0\,\rangle = \langle\, 0\,|F\,[\,H\,,\,F\,]|\,0\,\rangle$$

同様に

$$\langle\, 0\,|[\,H\,,\,F\,]|\,n\,\rangle = -\,\hbar\omega_n\,\langle\, 0\,|F|\,n\,\rangle$$

より

$$S = -\sum_n \langle\, 0\,|[\,H\,,\,F\,]|\,n\,\rangle\langle\, n\,|F|\,0\,\rangle = -\,\langle\, 0\,|[\,H\,,\,F\,]\,F\,|\,0\,\rangle$$

したがって

$$S = \frac{1}{2}\Big(\langle\, 0\,|F\,[\,H\,,\,F\,]|\,0\,\rangle - \langle\, 0\,|[\,H\,,\,F\,]\,F\,|\,0\,\rangle\Big) = \frac{1}{2}\langle\, 0\,|\,[\,F\,,\,[\,H\,,\,F\,]\,]\,|\,0\,\rangle \tag{3.79}$$

である。

多体系の励起エネルギー $\hbar\omega_n$ と $\langle n|F|0\rangle$ を正確に全て求めることは不可能であるが, これらの和である energy weighted sum (3.79) は比較的容易に求めることができる場合がある。例えば, ハミルトニアン H を

$$H = T + V\,, \qquad T = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{\nabla}_i^2\,, \qquad V = \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N} v(i,j)$$

とし, F が粒子の位置 $\boldsymbol{r}_i$ の関数

$$F = \sum_{i=1}^{N} f(\boldsymbol{r}_i)$$

の場合, 相互作用 $v(i,j)$ が運動量に依存しないとすると $[\,V\,,\,F\,] = 0$ であるから

$$[\,H\,,\,F\,] = [\,T\,,\,F\,] = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}[\,\boldsymbol{\nabla}_i^2\,,\,f(\boldsymbol{r}_i)\,] = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\Big(\boldsymbol{\nabla}_i\cdot[\,\boldsymbol{\nabla}_i\,,\,f(\boldsymbol{r}_i)\,] + [\,\boldsymbol{\nabla}_i\,,\,f(\boldsymbol{r}_i)\,]\cdot\boldsymbol{\nabla}_i\Big)$$

ところで

$$\boldsymbol{\nabla}_i\,f(\boldsymbol{r}_i) = (\boldsymbol{\nabla}_i f(\boldsymbol{r}_i)) + f(\boldsymbol{r}_i)\boldsymbol{\nabla}_i$$

ここで, 右辺第 1 項の $\boldsymbol{\nabla}_i$ は $f(\boldsymbol{r}_i)$ にだけ作用する。これを明確にするため括弧をつけた。これから

$$[\,H\,,\,F\,] = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\Big(\boldsymbol{\nabla}_i\cdot(\boldsymbol{\nabla}_i f(\boldsymbol{r}_i)) + (\boldsymbol{\nabla}_i f(\boldsymbol{r}_i))\cdot\boldsymbol{\nabla}_i\Big)$$

更に

$$\begin{aligned}[\,F\,,\,[\,H\,,\,F\,]\,] &= -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\Big([\,f(\boldsymbol{r}_i)\,,\boldsymbol{\nabla}_i\,]\cdot(\boldsymbol{\nabla}_i f(\boldsymbol{r}_i)) + (\boldsymbol{\nabla}_i f(\boldsymbol{r}_i))\cdot[\,f(\boldsymbol{r}_i)\,,\boldsymbol{\nabla}_i\,]\Big) \\ &= \frac{\hbar^2}{m}\sum_{i=1}^{N}(\boldsymbol{\nabla}_i f(\boldsymbol{r}_i))^2 = \frac{\hbar^2}{m}\int d^3r\;(\boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{r}))^2\sum_{i=1}^{N}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\end{aligned}$$

になる。したがって

$$S = \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\,\rho(\boldsymbol{r})\,(\boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{r}))^2\,, \qquad \rho(\boldsymbol{r}) = \langle\,0\,|\sum_{i=1}^{N}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)|\,0\,\rangle$$

を得る。$\rho(\boldsymbol{r})$ は密度分布であり

$$\int d^3r\,\rho(\boldsymbol{r}) = \text{粒子数} = N$$

である。基底状態の密度分布 $\rho(\boldsymbol{r})$ だけ分かれば energy weighted sum S は求まる。特別な場合として $f(\boldsymbol{r}) = z$ ならば $\boldsymbol{\nabla} f = (\,0,\,0,\,1\,)$ であるから

$$S = \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\,\rho(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar^2}{2m}\,N$$

になり近似せずに求まる。

energy weighted sum は応答関数 R_f を用いると (3.75) より

$$S = \int_0^\infty d\omega\,\hbar\omega\sum_n|\langle\,n\,|F|\,0\,\rangle|^2\,\delta(\omega-\omega_n) = -\frac{\hbar^2}{\pi}\int_0^\infty d\omega\,\omega\,\mathrm{Im}\,R_f(\omega)$$

と表せる。R_f の定義 (3.74) から $F = F^\dagger$ のとき $R_f^*(\omega) = R_f(-\,\omega)$ であるから

$$\mathrm{Im}\,R_f(\omega) = -\,\mathrm{Im}\,R_f^*(\omega) = -\,\mathrm{Im}\,R_f(-\,\omega)$$

これから

$$S = \frac{\hbar^2}{\pi}\int_0^{\infty} d\omega\,\omega\,\mathrm{Im}\,R_f(-\omega) = -\,\frac{\hbar^2}{\pi}\int_{-\infty}^{0} d\omega\,\omega\,\mathrm{Im}\,R_f(\omega)$$

したがって

$$S = -\,\frac{\hbar^2}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\,\omega\,\mathrm{Im}\,R_f(\omega) \tag{3.80}$$

と表せる。

RPA での energy weighted sum

$$S_{\mathrm{RPA}} \equiv \sum_{\lambda} \hbar\omega_\lambda\,|\langle\,\lambda\,|F|\,0\,\rangle|^2$$

を考える。ここで $\hbar\omega_\lambda\,,\,|\,\lambda\,\rangle$ は RPA 方程式の解である。このとき

$$S_{\mathrm{RPA}} = \frac{1}{2}\langle\,|\,[\,F\,,\,[\,H\,,\,F\,]\,]\,|\,\rangle \tag{3.81}$$

が成り立つ。ただし, $|\,\rangle$ は HF 基底状態, H は全ハミルトニアンである。

証明 BS 方程式 (3.76) から

$$R_f = R_f^0 + f^* R^0 \tilde{V} R^0 f + f^* R^0 \tilde{V} R^0 \tilde{V} R^0 f + \cdots$$

である。(3.80) を使うと RPA の energy weighted sum S_{RPA} は

$$S_{\mathrm{RPA}} = \sum_{n=0}^{\infty} S_n\,, \qquad S_n = -\,\frac{\hbar^2}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\,\omega\,\mathrm{Im}\left[f^* R^0(\omega)\left(\tilde{V} R^0(\omega)\right)^n f\,\right]$$

になる。(3.78) から S_0 は

$$\begin{aligned} S_0 &= -\,\frac{\hbar^2}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\,\omega\,\mathrm{Im}\sum_{ph}|f_{ph}|^2\left(\frac{1}{\hbar\omega - \epsilon_{ph} + i\varepsilon} - \frac{1}{\hbar\omega + \epsilon_{ph} + i\varepsilon}\right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\,\omega\,\sum_{ph}|f_{ph}|^2\left(\delta(\hbar\omega - \epsilon_{ph}) - \delta(\hbar\omega + \epsilon_{ph})\right) = \sum_{ph}\epsilon_{ph}\,|f_{ph}|^2 \end{aligned} \tag{3.82}$$

である。(3.73) を S_1 に代入すると

$$S_1 = -\,\frac{1}{2\pi}\mathrm{Im}\sum f^*_{\alpha\beta} f_{\alpha'\beta'} \widetilde{v}_{\alpha\beta'\,\beta\alpha'}\,(\theta_\beta - \theta_\alpha)\,(\theta_{\beta'} - \theta_{\alpha'})\,I_1 \tag{3.83}$$

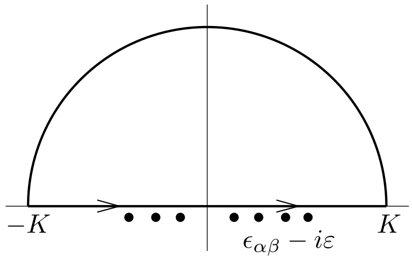
ただし ($x = \hbar\omega$)

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,g_1(x)\,, \qquad g_1(x) = \frac{x}{(x - \epsilon_{\alpha\beta} + i\varepsilon)(x - \epsilon_{\alpha'\beta'} + i\varepsilon)}$$

一般に, S_n の場合これに対応する積分は

$$I_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,g_n(x)\,, \qquad g_n(x) = \frac{x}{\underbrace{(x - \epsilon_{\alpha\beta} + i\varepsilon)(x - \epsilon_{\alpha'\beta'} + i\varepsilon)\cdots\cdots}_{n+1\,\text{個}}}$$

である。図のような複素平面上の経路 C を考えると，$g_n(x)$ の極はこの経路内には存在しないから



$$\int_C dx\, g_n(x) = 0$$

円周上では $x = Ke^{i\theta}$, $0 \le \theta \le \pi$ であるから

$$\int_{-K}^{K} dx\, g_n(x) + \int_0^{\pi} d\theta\, iKe^{i\theta} g_n(Ke^{i\theta}) = 0$$

である。$K \to \infty$ のとき $g_n(Ke^{i\theta}) \to K^{-n} e^{-in\theta}$ になるから

$$\int_{-K}^{K} dx\, g_n(x) + iK^{1-n} \int_0^{\pi} d\theta\, e^{i(1-n)\theta} = 0$$

$K \to \infty$ では左辺第 2 項は $n \ge 2$ のとき 0 になるから

$$I_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, g_n(x) = \begin{cases} -i\pi\,, & n = 1 \\ 0\,, & n \ge 2 \end{cases}$$

したがって $n \ge 2$ のとき $S_n = 0$ になり

$$S_{\rm RPA} = S_0 + S_1$$

である。I_1 を (3.83) に代入すると

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{1}{2} \, \mathrm{Re} \sum f^*_{\alpha\beta} f_{\alpha'\beta'} \widetilde{v}_{\alpha\beta'\,\beta\alpha'} \left(\theta_\beta - \theta_\alpha\right) \left(\theta_{\beta'} - \theta_{\alpha'}\right) \\ &= \frac{1}{2} \sum f^*_{\alpha\beta} f_{\alpha'\beta'} \widetilde{v}_{\alpha\beta'\,\beta\alpha'} \left(\theta_\beta - \theta_\alpha\right) \left(\theta_{\beta'} - \theta_{\alpha'}\right) \end{aligned} \tag{3.84}$$

以上で $S_{\rm RPA}$ が求まった。

次に

$$\frac{1}{2} \langle \,|\, [\, F \,,\, [\, H \,,\, F \,]\,] \,|\, \rangle = S_{\rm HF} + S_{\rm res}$$

ただし

$$S_{\rm HF} = \frac{1}{2} \langle \,|\, [\, F \,,\, [\, H_{\rm HF} \,,\, F \,]\,] \,|\, \rangle\,, \qquad S_{\rm res} = \frac{1}{2} \langle \,|\, [\, F \,,\, [\, V_{\rm res} \,,\, F \,]\,] \,|\, \rangle$$

を求める。H を HF の 1 粒子状態で表すと

$$H = H_{\rm HF} + V_{\rm res}\,, \quad H_{\rm HF} = \sum_\alpha \epsilon_\alpha a^\dagger_\alpha a_\alpha\,, \quad V_{\rm res} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \overline{v}_{\alpha\beta\,\alpha'\beta'} : a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta a_{\beta'} a_{\alpha'} :$$

定数 $-\frac{1}{2} \sum_{hh'} \overline{v}_{hh'\,hh'}$ は交換子には寄与しないから無視する。

$$[\, H_{\rm HF} \,,\, F \,] = \sum_{\alpha\beta} \epsilon_{\alpha\beta}\, f_{\alpha\beta}\, a^\dagger_\alpha a_\beta\,, \qquad \epsilon_{\alpha\beta} = \epsilon_\alpha - \epsilon_\beta$$

$$\begin{aligned} [\, F \,,\, [\, H_{\rm HF} \,,\, F \,]\,] &= \sum f_{\alpha\beta}\, \epsilon_{\alpha'\beta'}\, f_{\alpha'\beta'} [\, a^\dagger_\alpha a_\beta \,,\, a^\dagger_{\alpha'} a_{\beta'} \,] \\ &= \sum f_{\alpha\beta}\, \epsilon_{\alpha'\beta'}\, f_{\alpha'\beta'} \Big(\delta_{\beta\alpha'} a^\dagger_\alpha a_{\beta'} - \delta_{\alpha\beta'} a^\dagger_{\alpha'} a_\beta \Big) \end{aligned}$$

であるから

$$S_{\rm HF} = \frac{1}{2} \sum \epsilon_{\alpha'\beta'} f_{\alpha\beta}\, f_{\alpha'\beta'} \delta_{\beta\alpha'} \delta_{\alpha\beta'} \Big(\theta_\alpha - \theta_\beta \Big) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \epsilon_{\beta\alpha}\, |f_{\alpha\beta}|^2 \Big(\theta_\alpha - \theta_\beta \Big)$$

$\theta_\alpha = 1\,,\ \theta_\beta = 0$ または $\theta_\alpha = 0\,,\ \theta_\beta = 1$ であるから

$$S_{\rm HF} = \sum_{ph} \epsilon_{ph}\,|f_{ph}|^2 \tag{3.85}$$

になる。したがって

$$S_0 = S_{\rm HF} \tag{3.86}$$

である。交換子を展開すると

$$S_{\rm res} = \frac{1}{2}\langle\ |\Big(2FV_{\rm res}F - F^2V_{\rm res} - V_{\rm res}F^2\Big)|\ \rangle$$

F と $V_{\rm res}$ はエルミートであるから

$$\langle\ |FV_{\rm res}F|\ \rangle^* = \langle\ |FV_{\rm res}F|\ \rangle\,, \qquad \langle\ |F^2V_{\rm res}|\ \rangle^* = \langle\ |V_{\rm res}F^2|\ \rangle$$

したがって

$$S_{11} = \langle\ |FV_{\rm res}F|\ \rangle\,, \qquad S_{12} = \langle\ |F^2V_{\rm res}|\ \rangle$$

とすると

$$S_{\rm res} = \frac{1}{2}\Big(S_{11} - S_{12} + (S_{11} - S_{12})^*\Big)$$

である。

$$S_{11} = \langle\ |\,F\,V_{\rm res}\,F\,|\ \rangle = \frac{1}{4}\sum f_{\alpha\beta}f_{\alpha'\beta'}\widetilde{v}_{\mu\nu\,\mu'\nu'}\langle\ |\,a^\dagger_\alpha a_\beta : a^\dagger_\mu a^\dagger_\nu a_{\nu'}a_{\mu'} : a^\dagger_{\alpha'}a_{\beta'}\,|\ \rangle$$

(3.4), (3.23) と同様にすると

$$\begin{aligned}
\langle\ a^\dagger_\alpha a_\beta : a^\dagger_\mu a^\dagger_\nu a_{\nu'}a_{\mu'} : a^\dagger_{\alpha'}a_{\beta'}\ \rangle &= \langle\ a^\dagger_\alpha a_\beta : a^\dagger_\mu a^\dagger_\nu a_{\nu'}a_{\mu'} : a^\dagger_{\alpha'}a_{\beta'}\ \rangle + \langle\ a^\dagger_\alpha a_\beta : a^\dagger_\mu a^\dagger_\nu a_{\nu'}a_{\mu'} : a^\dagger_{\alpha'}a_{\beta'}\ \rangle \\
&\quad + \langle\ a^\dagger_\alpha a_\beta : a^\dagger_\mu a^\dagger_\nu a_{\nu'}a_{\mu'} : a^\dagger_{\alpha'}a_{\beta'}\ \rangle + \langle\ a^\dagger_\alpha a_\beta : a^\dagger_\mu a^\dagger_\nu a_{\nu'}a_{\mu'} : a^\dagger_{\alpha'}a_{\beta'}\ \rangle \\
&= \langle a^\dagger_\alpha a_{\mu'}\rangle\langle a_{\nu'}a^\dagger_{\alpha'}\rangle\Big(\langle a_\beta a^\dagger_\mu\rangle\langle a^\dagger_\nu a_{\beta'}\rangle - \langle a_\beta a^\dagger_\nu\rangle\langle a^\dagger_\mu a_{\beta'}\rangle\Big) - \Big(\mu' \leftrightarrow \nu'\Big)
\end{aligned}$$

$\langle a^\dagger_\alpha a_\beta\rangle = \theta_\alpha\delta_{\alpha\beta}\,,\ \langle a_\alpha a^\dagger_\beta\rangle = (1-\theta_\alpha)\delta_{\alpha\beta}$ であるから

$$\begin{aligned}
\langle\ a^\dagger_\alpha a_\beta : a^\dagger_\mu a^\dagger_\nu a_{\nu'}a_{\mu'} : a^\dagger_{\alpha'}a_{\beta'}\ \rangle &= \theta_\alpha\,(1-\theta_\beta)\,(1-\theta_{\alpha'})\,\theta_{\beta'} \\
&\quad \times\Big(\delta_{\mu'\alpha}\delta_{\nu'\alpha'} - \delta_{\mu'\alpha'}\delta_{\nu'\alpha}\Big)\Big(\delta_{\mu\beta}\delta_{\nu\beta'} - \delta_{\mu\beta'}\delta_{\nu\beta}\Big)
\end{aligned}$$

したがって

$$S_{11} = \sum f_{\alpha\beta}f_{\alpha'\beta'}\,\widetilde{v}_{\beta\beta'\,\alpha\alpha'}\,\theta_\alpha\,(1-\theta_\beta)\,(1-\theta_{\alpha'})\,\theta_{\beta'}$$

である。

$$\begin{aligned}
\langle\ a^\dagger_\alpha a_\beta a^\dagger_{\alpha'}a_{\beta'} : a^\dagger_\mu a^\dagger_\nu a_{\nu'}a_{\mu'} :\rangle &= \langle a^\dagger_\alpha a_{\mu'}\rangle\langle a^\dagger_{\alpha'}a_{\nu'}\rangle\Big(\langle a_\beta a^\dagger_\mu\rangle\langle a_{\beta'}a^\dagger_\nu\rangle - \langle a_\beta a^\dagger_\nu\rangle\langle a_{\beta'}a^\dagger_\mu\rangle\Big) - \Big(\mu' \leftrightarrow \nu'\Big) \\
&= \theta_\alpha\theta_{\alpha'}\,(1-\theta_\beta)\,(1-\theta_{\beta'}) \\
&\quad \times\Big(\delta_{\mu'\alpha}\delta_{\nu'\alpha'} - \delta_{\mu'\alpha'}\delta_{\nu'\alpha}\Big)\Big(\delta_{\mu\beta}\delta_{\nu\beta'} - \delta_{\mu\beta'}\delta_{\nu\beta}\Big)
\end{aligned}$$

より

$$S_{12} = \sum f_{\alpha\beta}f_{\alpha'\beta'}\,\widetilde{v}_{\beta\beta'\,\alpha\alpha'}\,\theta_\alpha\theta_{\alpha'}\,(1-\theta_\beta)\,(1-\theta_{\beta'})$$

これから

$$S_{11} - S_{12} = \sum f_{\alpha\beta} f_{\alpha'\beta'}\, \widetilde{v}_{\beta\beta'\,\alpha\alpha'}\, \theta_\alpha\, (1-\theta_\beta)\, (\theta_{\beta'} - \theta_{\alpha'})$$
$$= \sum f^*_{\alpha\beta} f_{\alpha'\beta'}\, \widetilde{v}_{\alpha\beta'\,\beta\alpha'}\, (1-\theta_\alpha)\, \theta_\beta\, (\theta_{\beta'} - \theta_{\alpha'})$$

ただし α と β を入れ換え $f_{\beta\alpha} = f^*_{\alpha\beta}$ を使った。複素共役は, α と β, α' と β' を入れ換えると

$$(S_{11} - S_{12})^* = -\sum f^*_{\alpha\beta} f_{\alpha'\beta'} \widetilde{v}_{\alpha\beta'\,\beta\alpha'}\, (1-\theta_\beta)\, \theta_\alpha\, (\theta_{\beta'} - \theta_{\alpha'})$$

になるから

$$S_{\rm res} = \frac{1}{2}\Big(S_{11} - S_{12} + (S_{11} - S_{12})^* \Big) = \frac{1}{2} \sum f^*_{\alpha\beta} f_{\alpha'\beta'}\, \widetilde{v}_{\alpha\beta'\,\beta\alpha'}\, (\theta_\beta - \theta_\alpha)\, (\theta_{\beta'} - \theta_{\alpha'}) \qquad (3.87)$$

である。(3.84) と比較すると $S_1 = S_{\rm res}$ であるから

$$S_{\rm RPA} = S_0 + S_1 = S_{\rm HF} + S_{\rm res} = \frac{1}{2} \langle\,|\,[\,F\,,\,[\,H\,,\,F\,]\,]\,|\,\rangle$$

になる。

問 3.4 (3.81) を別の方法で証明する。

1. (3.85) 及び (3.87) を ph 成分で具体的に表わすと

$$\frac{1}{2} \langle\,|\,[\,F\,,\,[\,H\,,\,F\,]\,]\,|\,\rangle = \frac{1}{2} \sum \Big(f^*_{ph} A_{ph\,p'h'} f_{p'h'} - f^*_{ph} B_{ph\,p'h'} f^*_{p'h'} - f_{ph} B^*_{ph\,p'h'} f_{p'h'}$$
$$+ f_{ph} A^*_{ph\,p'h'} f^*_{p'h'} \Big)$$
$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} f^* & -f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ -f^* \end{pmatrix}$$

   になることを示せ。ただし, A, B はそれぞれ (3.22), (3.24) で定義したものである。なお, F はエルミートであるから $f_{\alpha\beta} = f^*_{\beta\alpha}$ である。

2. (3.44) より

$$\langle \lambda | F | \, 0 \, \rangle = \begin{pmatrix} X^{\lambda *} & Y^{\lambda *} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ f^* \end{pmatrix}, \qquad \langle \lambda | F | \, 0 \, \rangle^* = \begin{pmatrix} f^* & -f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\lambda \\ -Y^\lambda \end{pmatrix} \qquad (3.88)$$

   である。これと RPA 方程式 (3.21) から

$$S_{\rm RPA} = \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda\, |\langle\, \lambda\, | F |\, 0\, \rangle|^2$$
$$= \sum_\lambda \begin{pmatrix} f^* & -f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\lambda \\ Y^\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^{\lambda *} & Y^{\lambda *} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ f^* \end{pmatrix}$$

   を示せ。

3. (3.88) を適当に並び替え (3.46) を使うと

$$S_{\rm RPA} = -\sum_\lambda \begin{pmatrix} f^* & -f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y^{\lambda *} \\ X^{\lambda *} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y^\lambda & X^\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ f^* \end{pmatrix}$$

   とも表せることを示せ。

4. 以上の結果と完備性 (3.53) から

$$S_{\mathrm{RPA}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} f^* & -f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ -f^* \end{pmatrix}$$

を示せ。

A　スレーター行列式と第二量子化

A.1　置換演算子

粒子 i が状態 $|\alpha_i\rangle$ にある N 粒子系の状態を

$$|\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}\cdots\alpha_N^{(N)}\rangle \equiv |\alpha_1\rangle^{(1)}|\alpha_2\rangle^{(2)}\cdots|\alpha_N\rangle^{(N)}$$

で表わす。上付きの添字 $^{(i)}$ は粒子 i の状態であることを示す。置換 p

$$p = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & N \\ p(1) & p(2) & \cdots & p(N) \end{pmatrix}$$

に対応する置換演算子 P を粒子 i が占めていた状態 $|\alpha_i\rangle$ を粒子 $p(i)$, ($p(i) = 1, 2, \cdots, N$) が占めるようにする演算子として定義する, つまり

$$\begin{aligned} P|\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}\cdots\alpha_N^{(N)}\rangle &\equiv |\alpha_1^{(p(1))}\alpha_2^{(p(2))}\cdots\alpha_N^{(p(N))}\rangle \\ &= |\alpha_{p^{-1}(1)}^{(1)}\alpha_{p^{-1}(2)}^{(2)}\cdots\alpha_{p^{-1}(N)}^{(N)}\rangle \qquad \text{(A.1)} \end{aligned}$$

である。ただし, p^{-1} は p の逆置換である。つまり, $j = p(i)$ とすると $i = p^{-1}(j)$ である。(A.1) のエルミート共役をとると

$$\begin{aligned} \langle\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}\cdots\alpha_N^{(N)}|P^\dagger|\beta_1^{(1)}\beta_2^{(2)}\cdots\beta_N^{(N)}\rangle &= \langle\alpha_{p^{-1}(1)}^{(1)}\alpha_{p^{-1}(2)}^{(2)}\cdots\alpha_{p^{-1}(N)}^{(N)}|\beta_1^{(1)}\beta_2^{(2)}\cdots\beta_N^{(N)}\rangle \\ &= \prod_{i=1}^{N}\langle\alpha_{p^{-1}(i)}|\beta_i\rangle \end{aligned}$$

$j = p^{-1}(i)$ とすると $i = p(j)$ であるから

$$\langle\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}\cdots\alpha_N^{(N)}|P^\dagger|\beta_1^{(1)}\beta_2^{(2)}\cdots\beta_N^{(N)}\rangle = \prod_{i=1}^{N}\langle\alpha_i|\beta_{p(i)}\rangle$$

ところで

$$\begin{aligned} \langle\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}\cdots\alpha_N^{(N)}|P^{-1}|\beta_1^{(1)}\beta_2^{(2)}\cdots\beta_N^{(N)}\rangle &= \langle\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}\cdots\alpha_N^{(N)}|\beta_{p(1)}^{(1)}\beta_{p(2)}^{(2)}\cdots\beta_{p(N)}^{(N)}\rangle \\ &= \prod_{i=1}^{N}\langle\alpha_i|\beta_{p(i)}\rangle \end{aligned}$$

したがって, $P^\dagger = P^{-1}$ であり, P はユニタリ演算子である。

一粒子演算子 $\hat{a}$ の固有値 a_m に属する固有ケットを $|a_m\rangle$ とする:

$$\hat{a}|a_m\rangle = a_m|a_m\rangle$$

添え字 m は $\hat{a}$ の固有値を適当に並べて番号付けたものであり, 粒子の番号とは無関係である。粒子 i についての演算子 $\hat{a}$ を $\hat{a}(i)$ で表すことにする。

$$P\hat{a}(i)P^\dagger|a_1^{(1)}\,a_2^{(2)}\cdots a_N^{(N)}\rangle = P\hat{a}(i)|a_{p(1)}^{(1)}\,a_{p(2)}^{(2)}\cdots a_{p(N)}^{(N)}\rangle$$

右辺では粒子 i の状態は $|a_{p(i)}\rangle$ になるから $\hat{a}(i)$ の固有値は $a_{p(i)}$ である。したがって

$$P\hat{a}(i)P^\dagger|a_1^{(1)}\,a_2^{(2)}\cdots a_N^{(N)}\rangle = a_{p(i)}P|a_{p(1)}^{(1)}\,a_{p(2)}^{(2)}\cdots a_{p(N)}^{(N)}\rangle = a_{p(i)}|a_1^{(1)}\,a_2^{(2)}\cdots a_N^{(N)}\rangle$$

これは $|a_1^{(1)} a_2^{(2)} \cdots a_N^{(N)}\rangle$ に粒子 $p(i)$ の演算子 $\hat{a}(p(i))$ が作用したのと同じであるから, 演算子はユニタリ変換 P により

$$P\hat{a}(i)P^\dagger = \hat{a}(p(i))$$

と変換される。この結果を一般化すれば, N 体系の演算子 $F(\hat{a}(1), \cdots, \hat{a}(N))$ は

$$PF(\hat{a}(1), \cdots, \hat{a}(N))P^\dagger = F(\hat{a}(p(1)), \cdots, \hat{a}(p(N)))$$

となる。一体演算子

$$F(\hat{a}(1), \cdots, \hat{a}(N)) = \sum_{i=1}^{N} \hat{a}(i)$$

の場合

$$PFP^\dagger = \sum_{i=1}^{N} \hat{a}(p(i)) = \sum_{i=1}^{N} \hat{a}(i) = F\,, \quad \text{つまり} \quad [\,P\,,\,F\,] = 0$$

である。

A.2　対称化・反対称化演算子

任意の置換は互換の積で表せる。積の形は一意には決まらないが, 偶置換 (偶数個の互換の積) か奇置換 (奇数個の互換の積) かは決まる。置換 p の偶奇性を $(-)^p$ で表し

$$(-)^p = \begin{cases} +1 & p \text{ が偶置換} \\ -1 & p \text{ が奇置換} \end{cases}$$

とする。

N 粒子系の状態を $|u\rangle$ とする。$N!$ 個のすべての置換演算子 P に対して

$$P|u\rangle = c_p|u\rangle \tag{A.2}$$

となる状態, つまり任意の置換演算子の固有状態 $|u\rangle$ としてどのようなものが存在しうるか考える。最初に, P として互換演算子の場合を扱う。粒子 i と j を交換する互換を P_{ij} で表す。P_{ij} を 2 回作用すれば元に戻るから $P_{ij}^2 = 1$ である。これから P_{ij} の固有値は $+1$ か -1 であり, $c_{ij} = \pm 1$ となる。ところで互換 (ij) は互換の積 $(1i)(2j)(12)(2j)(1i)$ と同じであるから

$$c_{ij} = c_{1i}c_{2j}c_{12}c_{2j}c_{1i} = c_{1j}^2 c_{2j}^2 c_{12} = c_{12}$$

c_p はすべての互換に対しては同じ値 c_{12} になる。任意の置換は互換の積であるから, これに対する c_p は c_{12} の積になり, 偶置換か奇置換かで偶数乗か奇数乗になる。以上から, 任意の P について (A.2) が成り立つのは, $c_{12} = 1$, $c_{12} = -1$ に対応して

$$P|u\rangle = |u\rangle \tag{A.3}$$

$$P|u\rangle = (-)^p|u\rangle \tag{A.4}$$

という 2 つの場合だけである。$|u\rangle$ が (A.3) を満たすとき N 粒子の置換に関して対称といい, (A.4) を満たすとき反対称という。

次に, 任意の状態から (A.3) あるいは (A.4) を満たす状態を作る演算子を求める。

$$S = \frac{1}{N!}\sum_P P\,, \qquad A = \frac{1}{N!}\sum_P (-)^p P$$

とする。ある置換演算子 P_1 を掛けると

$$P_1 S = \frac{1}{N!}\sum_P P_1 P$$

2 つの置換 P_1, P を行った結果はある 1 つの置換 $P' = P_1 P$ を行ったことと同じであるから

$$P_1 S = \frac{1}{N!}\sum_{P'} P' = S$$

同様に

$$P_1 A = \frac{1}{N!}\sum_P (-)^p P_1 P = \frac{(-)^{p_1}}{N!}\sum_P (-)^{p+p_1} P_1 P = \frac{(-)^{p_1}}{N!}\sum_{P'} (-)^{p'} P' = (-)^{p_1} A$$

P_1 を右側から掛けたときも同様であるから

$$P_1 S = S P_1 = S\,, \quad P_1 A = A P_1 = (-)^{p_1} A \tag{A.5}$$

となる。P_1 について和をとると

$$\frac{1}{N!}\sum_{P_1} P_1 S = S^2 = \frac{1}{N!}\sum_{P_1} S = S$$

$$\frac{1}{N!}\sum_{P_1} (-)^{p_1} P_1 A = A^2 = \frac{1}{N!}\sum_{P_1} (-)^{p_1}(-)^{p_1} A = A$$

したがって

$$S^2 = S\,, \quad A^2 = A \tag{A.6}$$

$P^\dagger = P^{-1}$ であり P と P^{-1} の偶奇性は同じであるから

$$A^\dagger = \frac{1}{N!}\sum_P (-)^p P^\dagger = \frac{1}{N!}\sum_P (-)^{p^{-1}} P^{-1} = A\,, \quad S^\dagger = S \tag{A.7}$$

である。

N 体系の任意の状態を $|\alpha\rangle$ とするとき

$$|\alpha\rangle_{\rm S} \equiv S|\alpha\rangle\,, \quad |\alpha\rangle_{\rm A} \equiv A|\alpha\rangle$$

を考える。(A.5) から

$$P|\alpha\rangle_{\rm S} = PS|\alpha\rangle = S|\alpha\rangle = |\alpha\rangle_{\rm S}\,, \quad P|\alpha\rangle_{\rm A} = PA|\alpha\rangle = (-)^p A|\alpha\rangle = (-)^p |\alpha\rangle_{\rm A}$$

したがって, $|\alpha\rangle_{\rm S}$ は (A.3) を満たす対称な状態であり, $|\alpha\rangle_{\rm A}$ は (A.4) を満たす反対称な状態である。この様に, S, A は任意の状態をそれぞれ対称化, 反対称化する演算子である。

N 個の同種粒子系では, 個々の粒子は量子力学的には区別できない。このため次の対称化の要請を導入する:

> N 個の同種粒子系の状態は任意の粒子の置換に関して対称かまたは反対称でなければならない。つまり, (A.3) あるいは (A.4) を満たす状態だけが許される。

状態が対称である粒子をボーズ粒子, 反対称である粒子をフェルミ粒子というわけである。反対称な状態は常に存在するとは限らない。$|\alpha\rangle$ で粒子 i と j が同じ 1 粒子状態を占めているとする。この場合 i と j を交換しても $|\alpha\rangle$ は不変であるから

$$P_{ij}|\alpha\rangle = |\alpha\rangle$$

(A.5) より互換 P_{ij} に対しては $AP_{ij} = -A$ である。したがって, 上の両辺に A を作用すると $A|\alpha\rangle = 0$ になる。反対称な状態はすべての粒子が異なる 1 粒子状態を占めるとき可能になる。これがパウリの排他原理である。

フェルミ粒子の多体系の規格化された状態は

$$|\alpha\rangle = C_N A|\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}\cdots\alpha_N^{(N)}\rangle$$

とおける。C_N は規格化定数である。$A^\dagger A = A^2 = A$ より

$$\begin{aligned}
\langle\alpha|\alpha\rangle &= |C_N|^2\langle\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}\cdots\alpha_N^{(N)}|A|\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}\cdots\alpha_N^{(N)}\rangle \\
&= \frac{|C_N|^2}{N!}\sum_P(-)^p\langle\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}\cdots\alpha_N^{(N)}|P|\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}\cdots\alpha_N^{(N)}\rangle \\
&= \frac{|C_N|^2}{N!}\sum_P(-)^p\langle\alpha_{p(1)}^{(1)}\alpha_{p(2)}^{(2)}\cdots\alpha_{p(N)}^{(N)}|\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}\cdots\alpha_N^{(N)}\rangle
\end{aligned}$$

α_i はすべて異なる状態であるから, $p(i) = i$ である恒等置換以外では内積は 0 になる。したがって $\langle\alpha|\alpha\rangle = |C_N|^2/N!$。規格化定数は $C_N = \sqrt{N!}$ とすればよい。規格化された状態は

$$\begin{aligned}
\sqrt{N!}A|\alpha_1^{(1)}\alpha_2^{(2)}\cdots\alpha_N^{(N)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P(-)^pP|\alpha_1\rangle^{(1)}|\alpha_2\rangle^{(2)}\cdots|\alpha_N\rangle^{(N)} \\
&= \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}
|\alpha_1\rangle^{(1)} & |\alpha_1\rangle^{(2)} & \cdots & |\alpha_1\rangle^{(N)} \\
|\alpha_2\rangle^{(1)} & |\alpha_2\rangle^{(2)} & \cdots & |\alpha_2\rangle^{(N)} \\
\vdots & & & \\
|\alpha_N\rangle^{(1)} & |\alpha_N\rangle^{(2)} & \cdots & |\alpha_N\rangle^{(N)}
\end{vmatrix}
\end{aligned}$$

である。これをスレーター行列式という。なお, 行列 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$ の行列式は

$$\det(a_{ij}) \equiv \sum_P(-)^p a_{1p(1)}a_{2p(2)}\cdots a_{Np(N)} = \sum_P(-)^p a_{p(1)1}a_{p(2)2}\cdots a_{p(N)N}$$

で定義される。

A.3　スレーター行列式

N 個のフェルミ粒子系のスレーター行列式を

$$|\alpha_1\cdots\alpha_N\rangle_{\mathrm{A}} \equiv \sqrt{N!}A|\alpha_1^{(1)}\cdots\alpha_N^{(N)}\rangle, \quad |\beta_1\cdots\beta_N\rangle_{\mathrm{A}} \equiv \sqrt{N!}A|\beta_1^{(1)}\cdots\beta_N^{(N)}\rangle$$

等で表す。ケットに付けた添字 A は反対称化された N 粒子系の状態であることを示す。$|\alpha_1\rangle$, $|\beta_1\rangle$ などは 1 粒子の状態であり, これらは互いに直交しているとする。

スレーター行列式の内積は

$$\begin{aligned}
{}_{\mathrm{A}}\langle\alpha_1\cdots\alpha_N|\beta_1\cdots\beta_N\rangle_{\mathrm{A}} &= \sum_P(-)^p\langle\alpha_1^{(1)}\cdots\alpha_N^{(N)}|P|\beta_1^{(1)}\cdots\beta_N^{(N)}\rangle \\
&= \sum_P(-)^p\langle\alpha_{p(1)}^{(1)}\cdots\alpha_{p(N)}^{(N)}|\beta_1^{(1)}\cdots\beta_N^{(N)}\rangle \\
&= \sum_P(-)^p\prod_{i=1}^N\langle\alpha_{p(i)}|\beta_i\rangle
\end{aligned}$$

したがって, 行列式の定義から

$$
{}_{\mathrm{A}}\langle \alpha_1 \cdots \alpha_N | \beta_1 \cdots \beta_N \rangle_{\mathrm{A}} = \det(d_{ij})\,, \qquad \text{ただし} \quad d_{ij} \equiv \langle \alpha_i | \beta_j \rangle = \delta_{\alpha_i \beta_j} \tag{A.8}
$$

である。行列 (d_{ij}) の余因子を D_{ij} とすると, 余因子展開により

$$
{}_{\mathrm{A}}\langle \alpha_1 \cdots \alpha_N | \beta_1 \cdots \beta_N \rangle_{\mathrm{A}} = \sum_{j=1}^{N} d_{ij} D_{ij}
$$

この和は i に依らないから

$$
{}_{\mathrm{A}}\langle \alpha_1 \cdots \alpha_N | \beta_1 \cdots \beta_N \rangle_{\mathrm{A}} = \frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^{N} d_{ij} D_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^{N} \langle \alpha_i | \beta_j \rangle D_{ij} \tag{A.9}
$$

である。

一体演算子 $F = \displaystyle\sum_{i=1}^{N} f(i)$ は任意の置換演算子と交換するから反対称化演算子 A とも交換する。さらに, $A^\dagger A = A^2 = A = A^\dagger$ であるから

$$
\begin{aligned}
{}_{\mathrm{A}}\langle \alpha_1 \cdots \alpha_N | F | \beta_1 \cdots \beta_N \rangle_{\mathrm{A}} &= N!\, \langle \alpha_1^{(1)} \cdots \alpha_N^{(N)} | A^\dagger F A | \beta_1^{(1)} \cdots \beta_N^{(N)} \rangle \\
&= N!\, \langle \alpha_1^{(1)} \cdots \alpha_N^{(N)} | A^\dagger F | \beta_1^{(1)} \cdots \beta_N^{(N)} \rangle \\
&= \sum_{j=1}^{N} \sum_{P} (-)^p \langle \alpha_1^{(1)} \cdots \alpha_N^{(N)} | P^\dagger f(j) | \beta_1^{(1)} \cdots \beta_N^{(N)} \rangle \\
&= \sum_{j=1}^{N} \sum_{P} (-)^p \langle \alpha_{p(j)} |\, f \,| \beta_j \rangle \prod_{k \neq j} \langle \alpha_{p(k)} | \beta_k \rangle
\end{aligned} \tag{A.10}
$$

$i = p(j)$ とおく。i は $1, 2, \cdots, N$ の値をとる。すべての P について和をとることは, i を与えたとき $p(j) = i$ となる置換 P について和をとり, それから i について和をとることと同等であるから

$$
{}_{\mathrm{A}}\langle \alpha_1 \cdots \alpha_N | F | \beta_1 \cdots \beta_N \rangle_{\mathrm{A}} = \sum_{i,j=1}^{N} \langle \alpha_i |\, f \,| \beta_j \rangle \Delta_{ij} \tag{A.11}
$$

ただし

$$
\Delta_{ij} \equiv \sum_{\substack{P \\ p(j)=i}} (-)^p \prod_{k \neq j} \langle \alpha_{p(k)} | \beta_k \rangle
$$

である。ここで $f(i) = 1$ とした式と (A.9) を比較すれば, $\Delta_{ij} = D_{ij}$ であることが分かる。

次に

$$
|\Psi\rangle \equiv \sum_{j=1}^{N} \sum_{\beta'} \langle \beta' |\, f \,| \beta_j \rangle | \beta_1 \cdots \beta_{j-1} \beta' \beta_{j+1} \cdots \beta_N \rangle_{\mathrm{A}}
$$

を考える。

$$
{}_{\mathrm{A}}\langle \alpha_1 \cdots \alpha_N | \Psi \rangle = \sum_{j=1}^{N} \sum_{\beta'} \langle \beta' |\, f \,| \beta_j \rangle\, {}_{\mathrm{A}}\langle \alpha_1 \cdots \alpha_N | \beta_1 \cdots \beta_{j-1} \beta' \beta_{j+1} \cdots \beta_N \rangle_{\mathrm{A}}
$$

上式では j 列要素は $d_{ij} = \langle \alpha_i | \beta' \rangle = \delta_{\alpha_i\, \beta'}$ であるから, j 列について余因子展開すると

$$
{}_{\mathrm{A}}\langle \alpha_1 \cdots \alpha_N | \beta_1 \cdots \beta_{j-1} \beta' \beta_{j+1} \cdots \beta_N \rangle_{\mathrm{A}} = \sum_{i=1}^{N} \delta_{\alpha_i\, \beta'} \Delta_{ij}
$$

である。したがって

$$ {}_{\mathrm{A}}\langle \alpha_1 \cdots \alpha_N | \Psi \rangle = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \langle \alpha_i |\, f\, | \beta_j \rangle \Delta_{ij} $$

これと (A.11) を比較すると

$$ F|\beta_1 \cdots \beta_N\rangle_{\mathrm{A}} = \sum_{j=1}^{N} \sum_{\beta'} \langle \beta' |\, f\, | \beta_j \rangle | \beta_1 \cdots \beta_{j-1} \beta' \beta_{j+1} \cdots \beta_N \rangle_{\mathrm{A}} \tag{A.12} $$

である。

A.4　生成・消滅演算子による状態の表現

状態 $|\alpha\rangle$ のフェルミ粒子を生成する演算子を $a^\dagger_\alpha$ とする。 $a^\dagger_\alpha$ は反交換関係

$$ \{\, a_\alpha\,,\, a^\dagger_{\alpha'}\, \} \equiv a_\alpha a^\dagger_{\alpha'} + a^\dagger_{\alpha'} a_\alpha = \delta_{\alpha\alpha'} \tag{A.13} $$

$$ \{\, a_\alpha\,,\, a_{\alpha'}\, \} \equiv a_\alpha a_{\alpha'} + a_{\alpha'} a_\alpha = 0 \tag{A.14} $$

$$ \{\, a^\dagger_\alpha\,,\, a^\dagger_{\alpha'}\, \} \equiv a^\dagger_\alpha a^\dagger_{\alpha'} + a^\dagger_{\alpha'} a^\dagger_\alpha = 0 \tag{A.15} $$

を満たす。すべての a_α に対して

$$ a_\alpha |\, 0\, \rangle = 0 $$

である状態 $|\, 0\, \rangle$ を真空という。

N 粒子系の状態

$$ |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle_{\mathrm{a}} \equiv a^\dagger_{\alpha_1} \cdots a^\dagger_{\alpha_N} |\, 0\, \rangle = \prod_{i=1}^{N} a^\dagger_{\alpha_i} |\, 0\, \rangle \tag{A.16} $$

を考える。この状態はスレーター行列式と全く同じ性質を持つ。

- $a^\dagger_\alpha a^\dagger_\alpha = 0$ であるから, 1 つの一粒子状態は 1 つの粒子のみが占めることができ, パウリの排他原理を満たす。
- $a^\dagger_\alpha$ の反交換関係 (A.15) のため $\alpha_1 \cdots \alpha_N$ を並べかえる置換 p に対して $(-)^p$ という符号変化をするから, $|\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle_{\mathrm{a}}$ は反対称化された状態である。
- (A.8) と同じ規格直交性

$$ {}_{\mathrm{a}}\langle \alpha_1 \cdots \alpha_N | \beta_1 \cdots \beta_N \rangle_{\mathrm{a}} = \det(d_{ij}) \tag{A.17} $$

を満たす。これを帰納法で示す。

$$ \begin{aligned} a_{\alpha_2} a_{\alpha_1} a^\dagger_{\beta_1} a^\dagger_{\beta_2} &= \delta_{\alpha_1\beta_1} a_{\alpha_2} a^\dagger_{\beta_2} - a_{\alpha_2} a^\dagger_{\beta_1} a_{\alpha_1} a^\dagger_{\beta_2} \\ &= \delta_{\alpha_1\beta_1} a_{\alpha_2} a^\dagger_{\beta_2} - \delta_{\alpha_2\beta_1} a_{\alpha_1} a^\dagger_{\beta_2} + a^\dagger_{\beta_1} a_{\alpha_2} a_{\alpha_1} a^\dagger_{\beta_2} \end{aligned} $$

であるから

$$ {}_{\mathrm{a}}\langle \alpha_1 \alpha_2 | \beta_1 \beta_2 \rangle_{\mathrm{a}} = \langle\, 0\, | a_{\alpha_2} a_{\alpha_1} a^\dagger_{\beta_1} a^\dagger_{\beta_2} |\, 0\, \rangle = \delta_{\alpha_1\beta_1} \delta_{\alpha_2\beta_2} - \delta_{\alpha_1\beta_2} \delta_{\alpha_1\beta_2} = \det(d_{ij}) $$

したがって, $N=2$ のとき (A.17) は成り立つ。次に, $N=k$ のとき (A.17) が成り立つとして $N=k+1$ の場合を考える。反交換関係 (A.13) より

$$ \begin{aligned} a_\alpha a^\dagger_{\beta_1} \cdots a^\dagger_{\beta_n} &= \delta_{\alpha\beta_1} a^\dagger_{\beta_2} \cdots a^\dagger_{\beta_n} - a^\dagger_{\beta_1} a_\alpha a^\dagger_{\beta_2} \cdots a^\dagger_{\beta_n} \\ &= \delta_{\alpha\beta_1} a^\dagger_{\beta_2} \cdots a^\dagger_{\beta_n} - \delta_{\alpha\beta_2} a^\dagger_{\beta_1} a^\dagger_{\beta_3} \cdots a^\dagger_{\beta_n} + a^\dagger_{\beta_1} a^\dagger_{\beta_2} a_\alpha a^\dagger_{\beta_3} \cdots a^\dagger_{\beta_n} \end{aligned} $$

a_α が $a^\dagger_{\beta_n}$ の右側に来るまで続けると

$$a_\alpha a^\dagger_{\beta_1}\cdots a^\dagger_{\beta_n} = \sum_{i=1}^{n}(-)^{i+1}\delta_{\alpha\beta_i}a^\dagger_{\beta_1}\cdots a^\dagger_{\beta_{i-1}}a^\dagger_{\beta_{i+1}}\cdots a^\dagger_{\beta_n} + (-)^n a^\dagger_{\beta_1}\cdots a^\dagger_{\beta_n}a_\alpha \tag{A.18}$$

となる。これから

$$\begin{aligned}
&{}_{\mathrm{a}}\langle\alpha_1\cdots\alpha_{k+1}|\beta_1\cdots\beta_{k+1}\rangle_{\mathrm{a}}\\
&= \langle\, 0\,|a_{\alpha_{k+1}}\cdots a_{\alpha_1}a^\dagger_{\beta_1}\cdots a^\dagger_{\beta_{k+1}}|\,0\,\rangle\\
&= \sum_{i=1}^{k+1}(-)^{i+1}\delta_{\alpha_1\beta_i}\langle\, 0\,|\underbrace{a_{\alpha_{k+1}}\cdots a_{\alpha_2}}_{k\text{ 個}}\underbrace{a^\dagger_{\beta_1}\cdots a^\dagger_{\beta_{i-1}}a^\dagger_{\beta_{i+1}}\cdots a^\dagger_{\beta_{k+1}}}_{k\text{ 個}}|\,0\,\rangle
\end{aligned}$$

$k+1$ 次の行列 $\boldsymbol{D}=(d_{ij})$ の i 行, j 列を除いた k 次の行列を $\boldsymbol{D}_{ij}$ とすると, $N=k$ の場合 (A.17) が成り立つとしているから

$$\langle\, 0\,|a_{\alpha_{k+1}}\cdots a_{\alpha_2}a^\dagger_{\beta_1}\cdots a^\dagger_{\beta_{i-1}}a^\dagger_{\beta_{i+1}}\cdots a^\dagger_{\beta_{k+1}}|\,0\,\rangle = \det(\boldsymbol{D}_{1i})$$

である。したがって, $(-1)^{i+j}\det(\boldsymbol{D}_{ij})$ が余因子であることに注意すれば

$${}_{\mathrm{a}}\langle\alpha_1\cdots\alpha_{k+1}|\beta_1\cdots\beta_{k+1}\rangle_{\mathrm{a}} = \sum_{i=1}^{k+1} d_{1i}(-1)^{i+1}\det(\boldsymbol{D}_{1i}) = \det(d_{ij})$$

(A.17) は $N=k+1$ の場合も成り立つ。

以上から, 状態 (A.16) はスレーター行列式と全く同じ性質を持つことがわかる。

A.5　生成・消滅演算子による演算子の表現

演算子を $a^\dagger_\alpha$, a_α を用いて表す。

$$F \equiv \sum_{\alpha\beta}\langle\alpha|\,f\,|\beta\rangle\, a^\dagger_\alpha a_\beta \tag{A.19}$$

とする。(A.18) より

$$\begin{aligned}
F|\beta_1\cdots\beta_N\rangle_{\mathrm{a}} &= \sum_{\alpha\beta}\langle\alpha|\,f\,|\beta\rangle\, a^\dagger_\alpha a_\beta\, a^\dagger_{\beta_1}\cdots a^\dagger_{\beta_N}|\,0\,\rangle\\
&= \sum_{\alpha\beta}\langle\alpha|\,f\,|\beta\rangle a^\dagger_\alpha\sum_{i=1}^{N}(-1)^{i+1}\delta_{\beta_i\beta}a^\dagger_{\beta_1}\cdots a^\dagger_{\beta_{i-1}}a^\dagger_{\beta_{i+1}}\cdots a^\dagger_{\beta_N}|\,0\,\rangle\\
&= \sum_{i=1}^{N}\sum_{\alpha}\langle\alpha|\,f\,|\beta_i\rangle a^\dagger_\alpha(-1)^{i+1}a^\dagger_{\beta_1}\cdots a^\dagger_{\beta_{i-1}}a^\dagger_{\beta_{i+1}}\cdots a^\dagger_{\beta_N}|\,0\,\rangle
\end{aligned}$$

$a^\dagger_\alpha$ を $a^\dagger_{\beta_{i-1}}$ の後に移動すると $(-1)^{i-1}$ の符号が付くが, これは $(-1)^{i+1}$ とキャンセルするから

$$\begin{aligned}
F|\beta_1\cdots\beta_N\rangle_{\mathrm{a}} &= \sum_{i=1}^{N}\sum_{\alpha}\langle\alpha|\,f\,|\beta_i\rangle\, a^\dagger_{\beta_1}\cdots a^\dagger_{\beta_{i-1}}a^\dagger_\alpha a^\dagger_{\beta_{i+1}}\cdots a^\dagger_{\beta_N}|\,0\,\rangle \qquad (\mathrm{A.20})\\
&= \sum_{i=1}^{N}\sum_{\alpha}\langle\alpha|\,f\,|\beta_i\rangle\,|\beta_1\cdots\beta_{i-1}\alpha\beta_{i+1}\cdots\beta_N\rangle_{\mathrm{a}}
\end{aligned}$$

これは (A.12) と同じ関係式である。したがって, 一体演算子 $F=\displaystyle\sum_{i=1}^{N}f(i)$ を生成・消滅演算子で表すと (A.19) になる。