

量子統計物理学

野村 清英

平成30年5月16日

目次

第0章		1
第1章	生成消滅演算子	3
1.1	生成消滅演算子 (ボソン)	3
1.1.1	個数証明	4
1.1.2	個数表示	6
1.1.3	位相と波動	7
1.2	生成消滅演算子 (フェルミオン)	9
1.2.1	個数証明	10
1.2.2	個数表示	11
1.2.3	位相と波動	11
1.3	多体系の生成消滅演算子	12
1.3.1	Bose 演算子の系	12
1.3.2	Fermi 演算子の系	12
1.3.3	Fock 空間	13
1.3.4	置換対称性	13
第2章	量子力学的多体問題と場の量子論	15
2.1	量子力学的多体問題と場の量子化	15
2.1.1	Bose 粒子の多体系	16
2.1.2	Fermi 粒子の多体系	20
2.1.3	Heisenberg 表示と Schrödinger 表示	21
2.2	量子場の理論と量子力学的多体系の等価性	22
2.2.1	Bose 粒子系	22
2.2.2	Fermi 粒子系	25
2.3	粒子間の相互作用	25
2.3.1	Heisenberg 表示	28
2.4	運動量表示	29
2.4.1	運動量演算子	30

2.5	場の量子化	31
2.5.1	実数場の量子化	31
2.5.2	物理的意味	33
2.5.3	複素場の波動方程式	35
2.6	体積無限大の極限	38
2.7	コヒーレント状態	39
2.7.1	コヒーレント状態とユニタリー変換	39
2.7.2	コヒーレント状態の非直交性と完全性	40
第3章	素励起	41
3.1	フォノン	41
3.1.1	1次元調和振動子	41
3.1.2	高次元	44
3.2	フェルミオン	45
3.2.1	自由電子気体	45
3.3	マグノン	50
3.3.1	1次元スピン系	51
3.3.2	強磁性基底状態	51
3.3.3	スピン波近似	55
3.4	その他の素励起	59
3.4.1	プラズモン	59
3.4.2	エキシトン	59
3.5	素励起の観測	60
3.5.1	中性子非弾性散乱	60
第4章	ボーズ・アインシュタイン凝縮とコヒーレント状態	63
4.1	問題設定	63
4.2	自発的対称性の破れ	64
4.2.1	粒子数確定の基底状態	64
4.2.2	コヒーレント状態 (粒子数不確定)	65
4.2.3	非対角長距離秩序	67
4.2.4	相互作用とコヒーレント状態	68
4.3	希薄な Bose 気体	68
4.3.1	Bogoliubov(ボゴリューボフ)変換	68
4.3.2	超流動の Landau 臨界条件	74
4.4	渦糸	74

4.4.1	特異点としての渦糸	76
4.4.2	渦糸の生成条件	77
4.4.3	多数の渦糸	78
4.5	Ginzburg-Landau 方程式	79
第 5 章	超伝導	81
5.1	Ginzburg-Landau 理論	81
5.1.1	Ginzburg-Landau 方程式	81
5.1.2	コヒーレンス長	82
5.1.3	凝縮 Cooper 対の超流動	83
5.1.4	ロンドン方程式	83
5.1.5	マイスナー効果	84
5.1.6	磁束の量子化	84
5.1.7	第 1 種超伝導体	85
5.1.8	第 2 種超伝導体	85
5.2	超伝導における Bogoliubov 変換 と BCS(Bardeen-Cooper-Schrieffer) 理論 (1957)	86
5.2.1	弱結合近似	89
付 録 A	演算子の公式	91
A.1	演算子の計算規則	91
A.2	Baker-Hausdorff の補助定理	92
A.3	Baker-Campbell-Hausdorff の公式	93
付 録 B	フーリエ展開	95
B.1	有限 Fourier 級数に関する公式	95
付 録 C	粒子数, 位相と不確定性関係	97
C.1	位相演算子と不確定性 (Dirac)	97
C.2	問題	98
C.3	不確定性関係と交換関係	98

第0章

文献紹介

- “Quantum Theory of Many-Particle Systems”
by Alexander L. Fetter, John Dirk Walecka
(Dover Publications (June 20, 2003))
「多体系の量子論」 フェッター、ワレッカ 著 (マクグロウヒル、絶版)
- “Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics”
by A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, I. E. Dzialoshinskii (Dover Publications; Revised edition (October 1, 1975))
- “Quantum Many-Particle Systems”
by J. W. Negele and H. Orland (Publisher: Westview Press (November 27, 1998))
- 「物性研究者のための場の量子論 I,II」 高橋 康 著 (培風館)
- 「統計力学 (第2版)」 阿部 龍蔵 著 (東京大学出版会)
- 「多体問題」 高野 文彦 著 (培風館、絶版)

第1章 生成消滅演算子

1.1 生成消滅演算子 (ボソン)

ある演算子 \hat{a} とそのエルミート共役 \hat{a}^\dagger を考える。
この2つの基本要素の積から、自己エルミートな演算子は、

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger\hat{a} \quad (1.1)$$

の2種類が得られる。これらの和および差は当然自己エルミートな演算子である。最も単純には、差を単位演算子 $\hat{1}$ と置くことが考えられる。

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{1} \quad (1.2)$$

(定数倍の違いは、 \hat{a} の再定義で吸収される)。これは交換関係を基本にしたことになる。以下の交換関係は自明である。

$$[\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0 \quad (1.3)$$

これらの交換関係を元にとすると、次の節の定理で示すように $\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$ の固有値は0又は正の整数である。従って \hat{n} を粒子数を表す個数演算子と解釈できる。

2種類のエルミート演算子 $\hat{a}\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger\hat{a}$ の交換関係の他に、もう一つ、

$$(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})/2 = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1/2 \quad (1.4)$$

というエルミート演算子が作られ、これが物理量と関連するだろう。波動の量子化の実験と結びつけるには、エネルギーに対応するハミルトン演算子

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})/2 = \hbar\omega(\hat{n} + 1/2) \quad (1.5)$$

と、運動量に当たる演算子

$$\hat{P} = \hbar k(\hat{n} + 1/2) \quad (1.6)$$

を導入し、その固有値の量子性を使えばよい。

上記では単一のモードのみ議論したが、物理系全体としては各モードの個数 \hat{n}_k をとり、エネルギー、運動量はその総和として表す。つまり、全エネルギーは

$$\hat{H} = \hbar \sum_k \omega_k (\hat{n}_k + 1/2) \quad (1.7)$$

全運動量は

$$\hat{P} = \hbar \sum_k k (\hat{n}_k + 1/2) = \hbar \sum_k k \hat{n}_k \quad (1.8)$$

となる (運動量に対しては、 k というモードに対し、必ず $-k$ のモードがあるので、定数 $1/2$ が打ち消し合う)。

ここでエネルギーに入っている定数 $\hbar\omega/2$ には、零点振動エネルギーという物理的意味¹ があり、超流動などで重要な役割を果たす。

この他に

$$\hat{q} \equiv (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)/\sqrt{2}, \quad \hat{p} \equiv (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)/(i\sqrt{2}), \quad (1.9)$$

もエルミート演算子であり、

$$[\hat{q}, \hat{p}] = (1/2i)[(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)] = i \quad (1.10)$$

であるが、これは座標と運動量の正準交換関係に対応する。

1.1.1 個数証明

以下の定理で演算子 $\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}$ の固有値が 0 又は正の整数であることを示す。

定理 1.1 次の交換関係

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \quad [\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0 \quad (1.11)$$

を満たす演算子に対し、エルミート演算子 $\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}$ の固有関係を

$$\hat{n}|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle \quad (1.12)$$

としたとき、固有値 ν は 0 又は正の整数である。

[証明]

¹電磁場などでは、 $(1/2)\sum_k \hbar\omega_k = \infty$ であるが、カシミール効果という意味づけができる。

1. 次の交換関係

$$[\hat{n}, \hat{a}] = \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a} = -\hat{a} \quad (1.13)$$

から

$$\hat{n}(\hat{a}|\nu\rangle) = (\hat{a}\hat{n} + [\hat{n}, \hat{a}]|\nu\rangle) = (\nu - 1)(\hat{a}|\nu\rangle) \quad (1.14)$$

が示される。つまり、 $\hat{a}|\nu\rangle$ は固有値 $\nu - 1$ の \hat{n} の固有状態である。この性質から、 \hat{a} を消滅演算子と呼ぶ。

2. 正の整数 k にたいし、

$$[\hat{n}, \hat{a}^k] = -k\hat{a}^k \quad (1.15)$$

が成り立つとしよう。この時、

$$[\hat{n}, \hat{a}^{k+1}] = \hat{a}[\hat{n}, \hat{a}^k] + [\hat{n}, \hat{a}]\hat{a}^k = \hat{a}(-k\hat{a}^k) + (-\hat{a})\hat{a}^k = -(k+1)\hat{a}^{k+1} \quad (1.16)$$

となる。したがって数学的帰納法から、正の整数 k に対し

$$[\hat{n}, \hat{a}^k] = -k\hat{a}^k \quad (1.17)$$

が成立する。

これから、

$$\hat{n}(\hat{a}^k|\nu\rangle) = (\nu - k)(\hat{a}^k|\nu\rangle) \quad (1.18)$$

ということがいえる。つまり、 $\hat{a}^k|\nu\rangle$ は固有値 $\nu - k$ の固有状態である。

3. 正值計量の条件より、

$$\langle \nu | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \nu \rangle = \langle \nu | \hat{n} | \nu \rangle \geq 0 \quad (1.19)$$

また、

$$\langle \nu | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \nu \rangle = \langle \nu | \hat{n} | \nu \rangle = \nu \langle \nu | \nu \rangle \quad (1.20)$$

従って、一般に $|\nu\rangle \neq 0$ なら \hat{n} の固有値 $\nu \geq 0$ 。

4. ここで任意の正の整数 k にたいし $\hat{a}^k|\nu\rangle \neq 0$ が成り立つとしよう。2) から $\hat{a}^k|\nu\rangle$ は固有値 $\nu - k$ の状態である。ところが十分大きな k に対し、 $\nu - k < 0$ となり得るので、3) の条件と矛盾する。

したがって、背理法から、ある整数 $l(l \geq 0)$ に対して、

$$\hat{a}^k |\nu\rangle \begin{cases} \neq 0 & (k \leq l), \\ = 0 & (k \geq l+1) \end{cases} \quad (1.21)$$

でなくてはならない。この時、 $\hat{a}^l |\nu\rangle \neq 0$ に対し

$$\hat{n} \hat{a}^l |\nu\rangle = (\nu - l) \hat{a}^l |\nu\rangle = 0 \quad (1.22)$$

なので、 $\nu = l$ である。[証明終]

最後に \hat{a}^\dagger の性質を調べる。

$$[\hat{n}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \quad (1.23)$$

から

$$\hat{n} \hat{a}^\dagger |\nu\rangle = (\nu + 1) \hat{a}^\dagger |\nu\rangle \quad (1.24)$$

が成り立つ。この性質から \hat{a}^\dagger を生成演算子と呼ぶ。

1.1.2 個数表示

次に個数演算子の固有状態の規格化を考える。式 (1.14) から $\hat{a}|n\rangle = C|n-1\rangle$ (C : 複素定数) である。この規格化定数 C を考察する。まず

$$\langle n|\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle = \langle n|\hat{n}|n\rangle = n \langle n|n\rangle \quad (1.25)$$

である。 $\langle n|n\rangle = \langle n-1|n-1\rangle = \dots = \langle 0|0\rangle = 1$ という規格化をとると、 $|C|^2 = n$ が得られる。位相の自由度を無視すると

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (1.26)$$

である。同様に、

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (1.27)$$

である。

これらの操作を繰り返すことで、規格化直交系を構成できる。つまり個数 0 個の真空状態を

$$\hat{a}|0\rangle = 0, \quad \langle 0|0\rangle = 1 \quad (1.28)$$

で定義したとき、規格化された固有状態は、

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \quad (1.29)$$

で与えられ、

$$\langle m|n\rangle = \delta_{m,n} \quad (1.30)$$

と言う関係式²を満たす。

また、生成消滅演算子を個数表示で表すと

$$\langle m|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{m,n-1}, \quad \langle m|\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} \quad (1.31)$$

である。

1.1.3 位相と波動

今まで扱った演算子には位相の自由度が残っている。つまり、 $\hat{a} \rightarrow \hat{a}(\phi) \equiv \exp(i\phi)\hat{a}$, (ϕ は実数) で理論 (交換関係と個数演算子) が不変である。この自由度の意味は何か？

まず、 $\hat{a}(\phi)$ を微分すると

$$\frac{d\hat{a}(\phi)}{d\phi} = i\hat{a}(\phi) = i \left[\hat{a}(\phi), \frac{1}{2}(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) \right] \quad (1.32)$$

が得られる。

次に位相変換を行なうユニタリー演算子を導入しよう。

$$\hat{U}(\phi)^\dagger \hat{a} \hat{U}(\phi) \equiv \exp(i\phi)\hat{a} \quad (1.33)$$

$\hat{U}(\phi)$ が微分可能として、 $\hat{a}(\phi)$ を微分すると、

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{a}(\phi)}{d\phi} &= \frac{d}{d\phi}(\hat{U}^\dagger(\phi)\hat{a}\hat{U}(\phi)) \\ &= \left[\hat{U}^\dagger(\phi)\hat{a}\hat{U}(\phi), \hat{U}^\dagger(\phi)\frac{d\hat{U}(\phi)}{d\phi} \right] \\ &= \left[\hat{a}(\phi), \hat{U}^\dagger(\phi)\frac{d\hat{U}(\phi)}{d\phi} \right] \end{aligned} \quad (1.34)$$

²これは $[\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^k] = k(\hat{a}^\dagger)^{k-1}$ を繰返し使うと直接示すことができる。

と言う別の表式が得られる。ここで、関係式

$$\frac{d}{dt}(\hat{F}F^{-1}) = \frac{d\hat{F}}{dt}\hat{F}^{-1} + \hat{F}\frac{dF^{-1}}{dt}, \quad \frac{d}{dt}(\hat{F}F^{-1}) = \frac{d\hat{1}}{dt} = 0 \quad (1.35)$$

から逆演算子の微分の表式を求めて使った。

2つの表式 (1.32) と (1.34) を比較して

$$\begin{aligned} \hat{U}(\phi)^\dagger \frac{d\hat{U}(\phi)}{d\phi} &= \frac{i}{2}(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) = i\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \\ \therefore \frac{d\hat{U}(\phi)}{d\phi} &= i\hat{U}(\phi)\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \end{aligned} \quad (1.36)$$

が導かれる。

ところで, (1.33) から

$$\hat{U}(\phi)^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{U}(\phi) = \hat{a}^\dagger\hat{a}, \quad \therefore [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{U}(\phi)] = 0 \quad (1.37)$$

なので位相変換のユニタリー演算子は個数演算子と交換する。

したがって, 式 (1.36) は (1.37) から積分できて, 位相変換のユニタリー演算子は

$$\hat{U}(\phi) = \exp(i\phi(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})/2) \quad (1.38)$$

となる。

位相変換のユニタリー演算子の性質を整理してみよう。

$$\hat{U}(\phi_1)\hat{U}(\phi_2) = \hat{U}(\phi_1 + \phi_2) \quad (1.39a)$$

$$\hat{U}(-\phi) = \hat{U}^{-1}(\phi) \quad (1.39b)$$

$$\hat{U}(0) = 1 \quad (1.39c)$$

以上は1パラメータ部分群としての性質である。さらに、

$$\frac{d\hat{U}(\phi)}{d\phi} = i(\hat{n} + 1/2)\hat{U}(\phi) \quad (1.40)$$

つまり、個数演算子は、無限小の位相変化の母関数 (generator) である。他に、個数演算子の固有値が整数より、

$$\hat{U}(\phi + 4\pi) = \hat{U}(\phi) \quad (1.41)$$

と言う周期性が成り立つ。

波動との関連を考えると、位相の項は、 $\phi \rightarrow kx - \omega t$ と置き換えられるだろう。先に時間発展の項のみとると、

$$\frac{d\hat{a}(t)}{dt} = -i[\hat{a}(t), \omega\hat{n}] \quad (1.42)$$

のようになるが、ハミルトン演算子を使うともっと一般的な関係に表される。例えば、上記のユニタリー演算子は、

$$\hat{U}(t) = \exp(-it\hat{H}/\hbar) \quad (1.43)$$

となる。位相の関係式を時間の関係式に置き直してみる。

$$\frac{d\hat{a}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{a}(t), \hat{H}] \quad (1.44)$$

はハイゼンベルク方程式に相当する。さらに、

$$\frac{d\hat{U}(t)}{dt} = \frac{\hat{H}}{i\hbar}\hat{U}(t) \quad (1.45)$$

は、時間発展を表すシュレディンガー方程式に相当する。また、無限小の時間発展とすると、

$$\hat{U}(dt) = 1 - idt\hat{H}/\hbar \quad (1.46)$$

つまり、ハミルトン演算子は無限小の時間発展の母関数である。

次に空間に関する項をとると、

$$\frac{d\hat{a}(x)}{dx} = i[\hat{a}(x), k\hat{n}] \quad (1.47)$$

のようになるが、運動量演算子を使うともっと一般的な関係に表現される。

$$\frac{d\hat{a}(x)}{dx} = -\frac{1}{i\hbar}[\hat{a}(x), \hat{P}] \quad (1.48)$$

1.2 生成消滅演算子 (フェルミオン)

前節と同様な考察を行なうが、別の可能性を考えるので、演算子の記号を変え、 \hat{c} としよう。

自己エルミートな演算子は、

$$\hat{c}\hat{c}^\dagger, \hat{c}^\dagger\hat{c} \quad (1.49)$$

の2種類定義される。この差(もちろん和も)は当然自己エルミートな演算子である。前節と異なり、和を単位演算子1としてみよう。

$$\{\hat{c}, \hat{c}^\dagger\} = 1 \quad (1.50)$$

これは反交換関係を基本にしたことになる。他に

$$\{\hat{c}, \hat{c}\} = \{\hat{c}^\dagger, \hat{c}^\dagger\} = 0 \quad (1.51)$$

も要請しよう(非自明な要請)。

この反交換関係を元にとすると、 $\hat{n} \equiv \hat{c}^\dagger \hat{c}$ の固有値が0,1であることが導かれる。従って \hat{n} を(フェルミ)個数を表す演算子と解釈できる。

また、

$$(\hat{c}^\dagger \hat{c} - \hat{c} \hat{c}^\dagger)/2 = \hat{c}^\dagger \hat{c} - 1/2 \quad (1.52)$$

はエネルギーと結びつけられる。なお、零点エネルギーの符号がボソンの場合と逆である³。

1.2.1 個数証明

演算子 $\hat{n} \equiv \hat{c}^\dagger \hat{c}$ の固有値が0,1であることを示そう。

定理 1.2 次の反交換関係

$$\{\hat{c}, \hat{c}^\dagger\} = 1, \{\hat{c}, \hat{c}\} = \{\hat{c}^\dagger, \hat{c}^\dagger\} = 0 \quad (1.53)$$

を満たす演算子に対し、エルミート演算子 $\hat{n} \equiv \hat{c}^\dagger \hat{c}$ の固有関係を

$$\hat{n}|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle$$

としたとき、固有値 ν は0または1である。

[証明] 反交換関係から

$$\hat{n}\hat{n} = \hat{c}^\dagger \hat{c} \hat{c}^\dagger \hat{c} = \hat{c}^\dagger (1 - \hat{c}^\dagger \hat{c}) \hat{c} = \hat{c}^\dagger \hat{c} = \hat{n} \quad (1.54)$$

となるので、 $\hat{n}(\hat{n} - 1) = 0$ で、 \hat{n} の固有値は0または1である。[証明終]

また、

$$\begin{aligned} [\hat{n}, \hat{c}] &= [\hat{c}^\dagger \hat{c}, \hat{c}] = \hat{c}^\dagger \{\hat{c}, \hat{c}\} - \{\hat{c}^\dagger, \hat{c}\} \hat{c} = -\hat{c}, \\ [\hat{n}, \hat{c}^\dagger] &= \hat{c}^\dagger \end{aligned} \quad (1.55)$$

から、 \hat{c}, \hat{c}^\dagger がそれぞれ消滅、生成演算子に当たる。

³超対称性が成り立てば、零点エネルギーの発散が互いに打ち消し合う。

1.2.2 個数表示

個数 0 個の真空状態は

$$\hat{c}|0\rangle = 0, \langle 0|0\rangle = 1 \quad (1.56)$$

で定義される。個数 1 個の固有状態は、

$$|1\rangle = \hat{c}^\dagger|0\rangle \quad (1.57)$$

で与えられ、これは規格化条件を満たしている。

$$\langle 1|1\rangle = \langle 0|\hat{c}\hat{c}^\dagger|0\rangle = \langle 0|(1 - \hat{c}^\dagger\hat{c})|0\rangle = 1 \quad (1.58)$$

この 2 つしか個数の固有状態はない。

また、

$$\hat{n}(\hat{c}|n\rangle) = (\hat{c}\hat{n} + [\hat{n}, \hat{c}]|n\rangle) = (n-1)(\hat{c}|n\rangle) \quad (1.59)$$

から $\hat{c}|n\rangle$ は個数演算子 \hat{n} の $n-1$ の固有状態 ($\hat{c}|n\rangle \propto |n-1\rangle$) である。さらに $\langle n|\hat{c}^\dagger\hat{c}|n\rangle = \langle n|\hat{n}|n\rangle = n$ より、

$$\hat{c}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (1.60)$$

同様に

$$\hat{n}(\hat{c}^\dagger|n\rangle) = (\hat{c}^\dagger\hat{n} + [\hat{n}, \hat{c}^\dagger]|n\rangle) = (n+1)(\hat{c}^\dagger|n\rangle) \quad (1.61)$$

から $\hat{c}^\dagger|n\rangle \propto |n+1\rangle$ である。さらに $\langle n|\hat{c}\hat{c}^\dagger|n\rangle = \langle n|(1 - \hat{c}^\dagger\hat{c})|n\rangle = 1 - n$ から

$$\hat{c}^\dagger|n\rangle = \sqrt{1-n}|n+1\rangle \quad (1.62)$$

1.2.3 位相と波動

フェルミオンの場合の位相と時間発展の関係は、交換関係

$$[\hat{n}, \hat{c}] = -\hat{c}, [\hat{n}, \hat{c}^\dagger] = \hat{c}^\dagger \quad (1.63)$$

から、ボソンの場合と全く同様に議論できる。

1.3 多体系の生成消滅演算子

1.3.1 Bose 演算子の系

実際の粒子は、運動量、スピンなどの固有の量子数を持っている。Bose 演算子の生成消滅演算子の代数をそのような場合に応用できるように拡張してみよう。それには、多くの生成消滅演算子の系 \hat{a}_l ($l = 1, 2, \dots$) を考える。ここでラベル l は、簡単のため離散的な値 $l = 1, 2, 3, \dots$ をとると仮定するが、連続的な場合にも形式的に拡張できる。

これらの演算子が Bose 交換関係

$$[\hat{a}_l, \hat{a}_l^\dagger] = \delta_{l,l'}, \quad [\hat{a}_l, \hat{a}_{l'}] = 0 \quad (1.64)$$

を満たしているとする、演算子

$$\hat{n}_l \equiv \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \quad (1.65)$$

の固有値は

$$n_l = 0, 1, 2, \dots, \infty \quad (1.66)$$

であり、これらに対する規格化直交ベクトルは

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \prod_{l=1} \frac{1}{\sqrt{n_l!}} (\hat{a}_l^\dagger)^{n_l} |0\rangle \quad (1.67)$$

であたえられる。ただし多体系の真空 $|0\rangle$ は

$$\hat{a}_l |0\rangle = 0, \quad \langle 0|0\rangle = 1 \quad (1.68)$$

を満たすものとする。

場の量子論では、演算子 \hat{n}_l がラベル l (例えば運動量とかスピン) を持つ Bose 統計に従う粒子の数を表す演算子になるので、それを l 状態にある粒子数演算子 (number operator) とよぶ。

1.3.2 Fermi 演算子の系

一方、演算子の系が Fermi 反交換関係

$$\{\hat{c}_l, \hat{c}_l^\dagger\} = \delta_{l,l'}, \quad \{\hat{c}_l, \hat{c}_{l'}\} = 0 \quad (1.69)$$

を満たしているとする、演算子

$$\hat{n}_l \equiv \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_l \quad (1.70)$$

の固有値は

$$n_l = 0, 1 \quad (1.71)$$

であり、これらに対する規格化直交ベクトルは

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \prod_l (\hat{c}_l^\dagger)^{n_l} |0\rangle \quad (1.72)$$

である。ここで、 n_1, n_2, \dots はそれぞれ 0 または 1 しか取らない数である。ここで、多体系の真空は

$$\hat{c}_l |0\rangle = 0, \quad \langle 0|0\rangle = 1 \quad (1.73)$$

を満たしている。

1.3.3 Fock 空間

規格化直交状態 (1.67) または (1.72) で張られる空間を Fock 空間という。

1.3.4 置換対称性

固有状態 (1.67) で表されるボソンの系は、交換関係 (1.64) のために、生成演算子の順序をどうとっても同じである。すなわち (1.67) のボソンの系はラベルの任意の入れ替えにたいして完全に対称である。

これに対し固有状態 (1.72) で表されるフェルミオンの系は、反交換関係 (1.69) のために、生成演算子の順序を互換すると符号が変わる。すなわちフェルミオンの系はラベルの入れ替えにたいして反対称である。

例

$$\hat{c}_1^\dagger \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_3^\dagger \hat{c}_4^\dagger |0\rangle = -\hat{c}_4^\dagger \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_3^\dagger |0\rangle \quad (1.74)$$

ところで、同一粒子の系で 2 粒子の入れ替え (置換) \hat{P} を考えると、すぐにわかるように $\hat{P}^2 = 1$ である。したがって \hat{P} のとることのできる固有値は 1 と -1 である。同一粒子からなる系は、任意の 2 粒子の入れ替え

に対して、完全対称 ($P = 1$, Bose-Einstein 統計) か、完全反対称かである ($P = -1$, Fermi-Dirac 統計)。Bose-Einstein 統計にしたがう系は交換関係 (1.64) をみたし、Fermi-Dirac 統計にしたがう系は反交換関係 (1.69) を満たすことが証明できる。

第2章 量子力学的多体問題と場の量子論

この章では、多粒子系の Schrödinger 方程式が、生成消滅演算子を用いることにより、量子化されたただ一つの場で表現できることを示す。

2.1 量子力学的多体問題と場の量子化

N 個のスピンの無い同種粒子からなる量子力学系を考えよう。各粒子の座標を \mathbf{x}_i ($i = 1, 2, \dots, N$) で表すと、全ハミルトニアンは

$$H_N = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i \quad (2.1)$$

ただし、

$$\mathcal{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V(\mathbf{x}_i) \quad (2.2)$$

なお簡単のため、粒子間には相互作用が無く、外部ポテンシャル $V(\mathbf{x}_i)$ のみはたらいているとしている。

この系を記述する Schrödinger 方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; t) = H_N \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; t) \quad (2.3)$$

である。

もしこれらの粒子が Bose 統計に従うなら波動関数 ψ は $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ の任意の交換に対して対称、Fermi 統計に従うなら反対称である。以下、2つの場合を別々に考える。

2.1.1 Bose 粒子の多体系

まず、一粒子の固有値問題

$$\mathcal{H}\phi_l(\mathbf{x}) = \epsilon_l\phi_l(\mathbf{x}) \quad (2.4)$$

が解けたとしよう．ここで

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x}) \quad (2.5)$$

である．すると、

$$\Phi_{l_1, \dots, l_N}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{(p)} \phi_{l_1}(\mathbf{x}_{p(1)}) \cdots \phi_{l_N}(\mathbf{x}_{p(N)}) \quad (2.6)$$

とおくことにより、

$$\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; t) = \exp(-iEt/\hbar)\Phi_{l_1, \dots, l_N}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \quad (2.7)$$

が Schrödinger 方程式 (2.3) の一つの解である。ただし、(2.6) の和は、 l_1, \dots, l_N を固定して、 $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ をいろいろ入れ換えた (置換、permutation) 全ての可能な項に付いて和を取ることを意味する。したがって $\Phi_{l_1, \dots, l_N}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ は $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ の任意の交換にたいして対称である。

なお、一粒子の波動関数 $\phi_l(\mathbf{x})$ は規格化されているとする。すなわち

$$\int d\mathbf{x} \phi_l^*(\mathbf{x})\phi_{l'}(\mathbf{x}) = \delta_{l,l'} \quad (2.8)$$

と言う規格化直交条件を満たしている。また、完全性の条件

$$\sum_l \phi_l(\mathbf{x})\phi_l^*(\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (2.9)$$

を満たしているものとする。

また、

$$E = \epsilon_{l_1} + \cdots + \epsilon_{l_N} \quad (2.10)$$

である。

この様な記述法では、「第1の粒子が状態 l_1 にあり、第2の粒子が状態 l_2 にあり、 \cdots 、第 N の粒子が状態 l_N にある」と考え、それに粒子が区別できないための補正、すなわち対称化を施したことになる。これとは別に、粒子が区別できないことを積極的に取入れ、とりえるエネルギー準位は同じだから、「最低エネルギー状態に n_1 個の粒子があり、次のエネルギー状態に n_2 個があり、 \cdots 」という具合に記述しても同等である。たとえば、前者の記述法で

1. 第1の粒子は ϵ_1 状態に
2. 第2の粒子は ϵ_3 状態に
3. 第3の粒子は ϵ_3 状態に
4. 第4の粒子は ϵ_4 状態に

となるものは、後者の記述法では

1. ϵ_1 状態には粒子が1個 ($n_1 = 1$)
2. ϵ_2 状態には粒子が0個 ($n_2 = 0$)
3. ϵ_3 状態には粒子が2個 ($n_3 = 2$)
4. ϵ_4 状態には粒子が1個 ($n_4 = 1$)

ということになる。

第2の記述法をとろう。まず、全粒子数が N という条件は

$$\sum_{k=1}^{\infty} n_k = N \quad (2.11)$$

と表される。次に全エネルギー E は次のように書き直すことができる。

$$E = \epsilon_{l_1} + \cdots + \epsilon_{l_N} = n_1\epsilon_1 + n_2\epsilon_2 + \cdots = \sum_{l=1}^{\infty} n_l\epsilon_l \quad (2.12)$$

そこで、前に考えた状態ベクトル Φ の代わりに新しい状態ベクトル

$$|n_1, n_2, \cdots\rangle$$

をとり、これにたいして

$$\hat{H}_0|n_1, n_2, \cdots\rangle = (n_1\epsilon_1 + n_2\epsilon_2 + \cdots)|n_1, n_2, \cdots\rangle \quad (2.13)$$

を固有値問題とする新しいハミルトニアン \hat{H}_0 を作ることを考えよう。

このようなハミルトニアンを手順を追って示すのはやや冗長なので、先に結果をあたえ、それが (2.13) を満足していることを示そう。一粒子の固有関数と生成消滅演算子から、次のような場の演算子

$$\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) \equiv \sum_l \hat{a}_l \phi_l(\mathbf{x}) \exp(-i\epsilon_l t/\hbar) \quad (2.14)$$

を作る．ここで、演算子 \hat{a}_l は Bose 交換関係

$$[\hat{a}_l, \hat{a}_{l'}^\dagger] = \delta_{l,l'}, \quad [\hat{a}_l, \hat{a}_{l'}] = 0 \quad (2.15)$$

にしたがい、また $\phi_l(\mathbf{x})$ は (2.4) を満たす固有関数系で、規格化直交条件 (2.8) と完全性の条件 (2.9) を満たしている．

そこで、

$$\hat{H}_0 = \int d\mathbf{x} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \nabla \hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) \right] \quad (2.16)$$

とすると、(2.13) が満たされている．

証明：

式 (2.14) を (2.16) に代入し、部分積分を行うと、

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_{l,l'} \int d\mathbf{x} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \phi_l^*(\mathbf{x}) \nabla \phi_{l'}(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x}) \phi_l^*(\mathbf{x}) \phi_{l'}(\mathbf{x}) \right] \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l'} \exp(i(\epsilon_l - \epsilon_{l'})t/\hbar) \\ &= \sum_{l,l'} \int d\mathbf{x} \phi_l^*(\mathbf{x}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right] \phi_{l'}(\mathbf{x}) \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l'} \exp(i(\epsilon_l - \epsilon_{l'})t/\hbar) \end{aligned} \quad (2.17)$$

ここで (2.4) と規格化直交条件 (2.8) を用いると

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_{l,l'} \int d\mathbf{x} \phi_l^*(\mathbf{x}) \phi_{l'}(\mathbf{x}) \epsilon_{l'} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l'} \exp(i(\epsilon_l - \epsilon_{l'})t/\hbar) \\ &= \sum_{l,l'} \delta_{l,l'} \epsilon_{l'} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l'} \exp(i(\epsilon_l - \epsilon_{l'})t/\hbar) \\ &= \sum_l \epsilon_l \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \end{aligned} \quad (2.18)$$

ところで、Bose 多体系の生成消滅演算子の系において、 $\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l$ の固有値は $n_l = 0, 1, 2, \dots$ で、固有状態は、

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \prod_l \frac{1}{\sqrt{n_l!}} (\hat{a}_l^\dagger)^{n_l} |0\rangle \quad (2.19)$$

で与えられる．

したがって \hat{H}_0 の固有値は (2.12) となり、 N 粒子系のハミルトニアンと一致する．

[証明終わり (Q.E.D)]

量子化された場の性質

次に、上記で導入した量子化された場 $\hat{\phi}(\mathbf{x}, t)$ の性質を調べてみる．まず量子化された場の運動方程式を調べよう．(2.14) を時間微分して (2.4) を用いることで、

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\phi}(\mathbf{x}, t) &= \sum_l \hat{a}_l \phi_l(\mathbf{x}) \epsilon_l \exp(-i\epsilon_l t/\hbar) \\ &= \sum_l \hat{a}_l \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right] \phi_l(\mathbf{x}) \exp(-i\epsilon_l t/\hbar) \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right] \hat{\phi}(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (2.20)$$

を得る．これが、量子化された場 $\hat{\phi}(\mathbf{x}, t)$ の満たす運動方程式であり、一粒子の Schrödinger 方程式と同じ形である．

次に量子化された場の交換関係を求めてみよう．交換関係 (2.15) と、 $\phi_l(\mathbf{x})$ の完全性の条件 (2.9) より

$$\begin{aligned} [\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}', t)] &= \sum_{l, l'} \delta_{l, l'} \phi_l(\mathbf{x}) \phi_{l'}^*(\mathbf{x}') \exp(-i(\epsilon_l - \epsilon_{l'})t/\hbar) \\ &= \sum_l \phi_l(\mathbf{x}) \phi_l^*(\mathbf{x}') \\ &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \end{aligned} \quad (2.21)$$

および

$$[\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{\phi}(\mathbf{x}', t)] = 0 \quad (2.22)$$

を得る．

さらに Heisenberg の運動方程式に対応するものを計算すると、

$$\begin{aligned} [\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{H}_0] &= \sum_l \phi_l(\mathbf{x}) [\hat{a}_l, \hat{H}_0] \exp(-i\epsilon_l t/\hbar) \\ &= \sum_l \phi_l(\mathbf{x}) \epsilon_l \hat{a}_l \exp(-i\epsilon_l t/\hbar) \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\phi}(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (2.23)$$

となる。

まとめると、 N 個の粒子の量子力学系を議論するのに、Schrödinger 方程式 (2.3) を用いる代わりに、量子化された一つの場 $\hat{\phi}(\mathbf{x}, t)$ を考え、交換

関係として

$$[\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t), \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}', t)] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad [\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t), \hat{\varphi}(\mathbf{x}', t)] = 0 \quad (2.24)$$

をとり、ハミルトニアンとしては

$$\hat{H}_0 = \int d\mathbf{x} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \nabla \hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) \right] \quad (2.25)$$

をとり、運動方程式としては

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) = [\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t), \hat{H}_0] \quad (2.26)$$

をとればよい。Heisenberg の運動方程式 (2.26) にハミルトニアン (2.25) を代入し、交換関係 (2.24) を使うと Schrödinger 型の運動方程式が得られる。

Nota bene (N.B.)

N 個の量子力学系では全粒子数が (2.11) の条件を満たしていたが、上記 (2.24)-(2.26) で記述される系にはこの条件が無い。つまり第2量子化された場 $\hat{\varphi}$ の体系は、 $N = 1, 2, \dots, \infty$ まで含んだ Bose 粒子系の量子力学と同等である。

2.1.2 Fermi 粒子の多体系

Fermi 粒子系の多体系もただ1つの場であらわすことが可能である。それには、Bose 粒子系に関する前の議論を ϵ_l 状態にある粒子数 n_l が 0 または 1 に限られるように書換えればよい。

この場合、Fermi 演算子を用いて場の演算子を

$$\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) \equiv \sum_l \hat{c}_l \phi_l(\mathbf{x}) \exp(-i\epsilon_l t/\hbar) \quad (2.27)$$

のように定義する。ハミルトニアンには前と同様、

$$\hat{H}_0 = \int d\mathbf{x} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \nabla \hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) \right] \quad (2.28)$$

をとる。このハミルトニアンに (2.27) を代入すると

$$\hat{H}_0 = \sum_l \epsilon_l \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_l \quad (2.29)$$

が得られる .

この場合にも場の演算子 $\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t)$ は運動方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right] \hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) \quad (2.30)$$

および Heisenberg の運動方程式

$$[\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t), \hat{H}_0] = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) \quad (2.31)$$

を満たしている .

また、量子化された場が反交換関係

$$\{\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t), \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}', t)\} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad \{\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t), \hat{\varphi}(\mathbf{x}', t)\} = 0 \quad (2.32)$$

を満たすことも容易に証明できる .

2.1.3 Heisenberg 表示と Schrödinger 表示

以上の議論では、場の演算子 $\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t)$ の作用する状態をあらわに出さなかった . 実は、これまで場の演算子 $\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t)$ を時間に依存するようについたので、これは Heisenberg 表示にあたり、状態ベクトル $|\Psi(0)\rangle$ が時間に依存しないのであらわに考える必要がなかった .

ところで、場の演算子 $\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t)$ で $t = 0$ とおき、

$$\hat{\varphi}(\mathbf{x}) \equiv \hat{\varphi}(\mathbf{x}, 0) \quad (2.33)$$

とすると、 $\hat{\varphi}(\mathbf{x})$ は Schrödinger 表示における場の量となる . Heisenberg の運動方程式により

$$\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) = \exp(i\hat{H}_0 t/\hbar) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \exp(-i\hat{H}_0 t/\hbar) \quad (2.34)$$

と書けるので、交換関係、反交換関係は元のままである . Schrödinger 表示におけるハミルトニアンは

$$\hat{H}_0 = \int d\mathbf{x} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \nabla \hat{\varphi}(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \right] \quad (2.35)$$

となる . Schrödinger 表示ではハミルトニアンは時間に依存しない . Schrödinger 表示の状態ベクトルは $|\Psi(t)\rangle = \exp(-i\hat{H}_0 t/\hbar) |\Psi(0)\rangle$ であるので、Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H}_0 |\Psi(t)\rangle \quad (2.36)$$

が成立する .

2.2 量子場の理論と量子力学的多体系の等価性

2.2.1 Bose 粒子系

量子化された場の理論が、 $N = 1, 2, \dots, \infty$ を一挙に表していることを、まず Bose 粒子系の場合に付いて説明しよう。

Schrödinger 表示で必要な方程式を書くと、運動方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H}_0 |\Psi(t)\rangle \quad (2.37)$$

ハミルトニアンは

$$\hat{H}_0 = \int d\mathbf{x} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \nabla \hat{\phi}(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x}) \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\phi}(\mathbf{x}) \right] \quad (2.38)$$

交換関係は

$$[\hat{\phi}(\mathbf{x}), \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}')] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad [\hat{\phi}(\mathbf{x}), \hat{\phi}(\mathbf{x}')] = 0 \quad (2.39)$$

交換関係 (2.39) から $\hat{\phi}(\mathbf{x})$ は、連続なラベル \mathbf{x} を持つ消滅演算子と見なすことができる。同様に $\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x})$ は、連続なラベル \mathbf{x} を持つ生成演算子と見なすことができる。そこで、これに対応する状態ベクトルの系を

$$|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \cdots \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}_N) |0\rangle \quad (N = 0, 1, 2, \dots) \quad (2.40)$$

としよう。この状態ベクトルは交換関係 (2.39) より $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ の置換について完全対称である。なお真空は

$$\hat{\phi}(\mathbf{x})|0\rangle = 0, \quad \langle 0|0\rangle = 1 \quad (2.41)$$

を満たす。

状態ベクトル (2.40) の規格化直交条件は

$$\langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_M \rangle = \delta_{M,N} \frac{1}{N!} \sum_{(p)} \delta(\mathbf{x}'_{p(1)} - \mathbf{x}_1) \cdots \delta(\mathbf{x}'_{p(N)} - \mathbf{x}_N) \quad (2.42)$$

となる。ここで、右辺の $\sum_{(p)}$ は、 $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ を固定して、 $\mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N$ のあらゆる可能な組み合わせ ($N!$ 個) について和を取ることを意味する。

例 N=1

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{x}_1 | \mathbf{x}'_1 \rangle &= \langle 0 | \hat{\varphi}(\mathbf{x}_1) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}'_1) | 0 \rangle \\
 &= \langle 0 | \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}'_1) \hat{\varphi}(\mathbf{x}_1) + \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) | 0 \rangle \\
 &= \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1)
 \end{aligned} \tag{2.43}$$

N=2

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2 \rangle &= \frac{1}{2!} \langle 0 | \hat{\varphi}(\mathbf{x}_2) \hat{\varphi}(\mathbf{x}_1) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}'_1) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}'_2) | 0 \rangle \\
 &= \frac{1}{2!} \langle 0 | \hat{\varphi}(\mathbf{x}_2) \{ \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}'_1) \hat{\varphi}(\mathbf{x}_1) + \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \} \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}'_2) | 0 \rangle \\
 &= \frac{1}{2!} \langle 0 | \hat{\varphi}(\mathbf{x}_2) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}'_1) \{ \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}'_2) \hat{\varphi}(\mathbf{x}_1) + \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_2) \} | 0 \rangle \\
 &\quad + \frac{1}{2!} \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \langle 0 | \hat{\varphi}(\mathbf{x}_2) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}'_2) | 0 \rangle \\
 &= \frac{1}{2!} \{ \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \delta(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}'_2) + \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_2) \delta(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}'_1) \}
 \end{aligned} \tag{2.44}$$

一般の N については数学的帰納法を使うと、証明できる。

また、状態ベクトル (2.40) の完全性の関係は

$$\sum_{N=0}^{\infty} \int d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_N |\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N\rangle \langle \mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N| = \hat{I} \tag{2.45}$$

である。

さて、完全規格化直交ベクトルの系 (2.40) を用いて、状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ を展開することができる。

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} \int d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_N |\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N\rangle \psi(\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N; t) \tag{2.46}$$

ここで $\psi(\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N; t) = \langle \mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N | \Psi(t) \rangle$ は展開係数で、 $\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N$ の対称関数である。また完全性関係 (2.45) を使っている。状態ベクトル $\Psi(t)$ の上記の展開式を Schrödinger 方程式 (2.37) に代入すると

$$\begin{aligned}
 &\sum_{N=0}^{\infty} \int d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_N |\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N\rangle i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N; t) \\
 &= \sum_{N=0}^{\infty} \int d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_N \hat{H}_0 |\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N\rangle \psi(\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N; t)
 \end{aligned} \tag{2.47}$$

を得る .

ところで、交換関係 (2.39) を使うと、ハミルトアン (2.38) と場の演算子の交換関係は、

$$[\hat{H}_0, \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_i)] = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V(\mathbf{x}_i) \right) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_i) = \mathcal{H}_i \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_i) \quad (2.48)$$

である . したがって

$$\hat{H}_0 |\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\rangle = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i |\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\rangle = H_N |\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\rangle \quad (2.49)$$

を得る . ここでは、交換関係 (2.48) を使って \hat{H}_0 を順次右側に移項し、最後に真空の条件から得られる $\hat{H}_0 |0\rangle = 0$ を使った .

式 (2.47) に (2.49) を代入し、左から $\langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N |$ を掛けると

$$\begin{aligned} & \sum_{M=0}^{\infty} \int d\mathbf{x}'_1 \cdots d\mathbf{x}'_M \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | H'_M | \mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_M \rangle \psi(\mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_M; t) \\ &= \sum_{M=0}^{\infty} \int d\mathbf{x}'_1 \cdots d\mathbf{x}'_M \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_M \rangle i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_M; t) \\ &= \int d\mathbf{x}'_1 \cdots d\mathbf{x}'_N \frac{1}{N!} \sum_{(p)} \delta(\mathbf{x}'_{p(1)} - \mathbf{x}_1) \cdots \delta(\mathbf{x}'_{p(N)} - \mathbf{x}_N) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N; t) \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; t) \end{aligned} \quad (2.50)$$

となる (なお規格化直交条件 (2.42) 及び $\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; t)$ が $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ の置換について対称ということを使っている) .

さらに部分積分を使って ∇_i^2 の項を移項すると、

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; t) \\ &= \sum_{M=0}^{\infty} \int d\mathbf{x}'_1 \cdots d\mathbf{x}'_M \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_M \rangle H'_M \psi(\mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_M; t) \\ &= H_N \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; t) \end{aligned} \quad (2.51)$$

を得る . 最後の段階で再び規格化直交条件 (2.42) を用いた .

この結果は N 体の Schrödinger 方程式 (2.3) と同じである .

2.2.2 Fermi 粒子系

以上 Bose 粒子系の場合を議論したが、Fermi 粒子系の場合も規格化直交条件を変えるだけでそのまま議論が成り立つ。この場合、量子化された場は反交換関係を満たすので、規格化直交ベクトル

$$|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \cdots \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_N) |0\rangle \quad (2.52)$$

は $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ の任意の偶置換に対しては符号を変えないが、奇置換に対しては符号を変える。

これに対応して規格化直交条件は

$$\langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_M \rangle = \delta_{N,M} \frac{1}{N!} \sum_{(p)} \text{sgn}(p) \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_{p(1)}) \cdots \delta(\mathbf{x}_N - \mathbf{x}'_{p(N)}) \quad (2.53)$$

となる。ここで $\sum_{(p)}$ は、前と同様に全ての置換 (p) についての和を取る。ただし、 $\text{sgn}(p)$ は p が偶置換なら 1、奇置換なら -1 という記号である。

この規格化直交条件を用いて、前と同様に反交換関係を満たす量子化された場の理論が Fermi 粒子の量子力学的多体系に等しいことを示すことができる。

2.3 粒子間の相互作用

今までは各粒子間に相互作用がない場合を扱ってきた。次に粒子間に相互作用ハミルトニアン

$$H_{\text{int}} = \sum_{i < j}^N U(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|) = \frac{1}{2} \sum_{k \neq l}^N U(|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l|) \quad (2.54)$$

が働いている場合を考察しよう。

この場合は Schrödinger 表示で

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle \quad (2.55)$$

および

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}, \\ \hat{H}_{\text{int}} &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}') U(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \hat{\varphi}(\mathbf{x}') \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (2.56)$$

としておけばよい．

Bose 系

$$[\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}')] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad [\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{\varphi}(\mathbf{x}')] = 0 \quad (2.57)$$

に限って議論する．この場合も完全規格化直交ベクトル系は (2.40) である．したがって $|\Psi(t)\rangle$ を展開すると、

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} \int d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_N |\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N\rangle \psi(\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N; t) \quad (2.58)$$

これを Schrödinger 方程式に代入すると、 \hat{H} の中の \hat{H}_0 については前の計算がそのまま使えるので、

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N; t) \\ &= H_N \psi(\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N; t) \\ &+ \sum_{M=0}^{\infty} \int d\mathbf{x}'_1 \cdots d\mathbf{x}'_M \langle \mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N | \hat{H}_{\text{int}} | \mathbf{x}'_1, \cdots, \mathbf{x}'_M \rangle \psi(\mathbf{x}'_1, \cdots, \mathbf{x}'_M; t) \end{aligned} \quad (2.59)$$

となる．最後の項の計算は次のようにする．交換関係と真空の条件を用いると

$$\hat{\varphi}(\mathbf{y}) |\mathbf{x}'_1, \cdots, \mathbf{x}'_M\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{i=1}^M \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}'_i) |\mathbf{x}'_1, \cdots, \mathbf{x}'_{i-1}, \mathbf{x}'_{i+1}, \cdots, \mathbf{x}'_M\rangle \quad (2.60)$$

したがって

$$\begin{aligned} & \hat{\varphi}(\mathbf{y}') \hat{\varphi}(\mathbf{y}) |\mathbf{x}'_1, \cdots, \mathbf{x}'_M\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{M(M-1)}} \sum_{i \neq j}^M \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}'_i) \delta(\mathbf{y}' - \mathbf{x}'_j) \\ & \times |\mathbf{x}'_1, \cdots, \mathbf{x}'_{i-1}, \mathbf{x}'_{i+1}, \cdots, \mathbf{x}'_{j-1}, \mathbf{x}'_{j+1}, \cdots, \mathbf{x}'_M\rangle \end{aligned} \quad (2.61)$$

最後の項は、 $|\mathbf{x}'_1, \cdots, \mathbf{x}'_M\rangle$ から、 \mathbf{x}'_i と \mathbf{x}'_j を取り除いたものである．同一の \mathbf{x}'_i は2度は取り除けないので $i \neq j$ という条件で和を取っている．

次にこの式の Hermite 共役を取ると

$$\begin{aligned}
& \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{y}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{y}') \\
&= \frac{1}{\sqrt{N(N-1)}} \sum_{k \neq l}^N \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}_k) \delta(\mathbf{y}' - \mathbf{x}_l) \\
& \times \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{k-1}, \mathbf{x}_{k+1}, \dots, \mathbf{x}_{l-1}, \mathbf{x}_{l+1}, \dots, \mathbf{x}_N | \quad (2.62)
\end{aligned}$$

そこで, (2.61) と (2.62) の内積をとると, 直交条件 (2.42) により

$$\begin{aligned}
& \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{y}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{y}') \hat{\varphi}(\mathbf{y}') \hat{\varphi}(\mathbf{y}) | \mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_M \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N(N-1)M(M-1)}} \sum_{i \neq j}^M \sum_{k \neq l}^N \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}_k) \delta(\mathbf{y}' - \mathbf{x}_l) \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}'_i) \delta(\mathbf{y}' - \mathbf{x}'_j) \\
& \times \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{k-1}, \mathbf{x}_{k+1}, \dots, \mathbf{x}_{l-1}, \mathbf{x}_{l+1}, \dots, \mathbf{x}_N | \\
& \times | \mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_{i-1}, \mathbf{x}'_{i+1}, \dots, \mathbf{x}'_{j-1}, \mathbf{x}'_{j+1}, \dots, \mathbf{x}'_M \rangle \\
&= \delta_{N,M} \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i \neq j}^N \sum_{k \neq l}^N \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}_k) \delta(\mathbf{y}' - \mathbf{x}_l) \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}'_i) \delta(\mathbf{y}' - \mathbf{x}'_j) \\
& \times \frac{1}{(N-2)!} \sum_{(p)}'' \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_{p(1)}) \cdots \delta(\mathbf{x}_N - \mathbf{x}'_{p(N)}) \quad (2.63)
\end{aligned}$$

最後の $\sum_{(p)}''$ の項では, $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ から \mathbf{x}_k と \mathbf{x}_l を取り除いたものと, $\mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N$ から \mathbf{x}'_i と \mathbf{x}'_j を取り除いたものとの全ての組み合わせについて和を取る. これに $\frac{1}{2}U(|\mathbf{y} - \mathbf{y}'|)$ を掛け, \mathbf{y} と \mathbf{y}' について積分すると

$$\begin{aligned}
& \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | \hat{H}_{\text{int}} | \mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_M \rangle \\
&= \frac{1}{2} \delta_{N,M} \frac{1}{N!} \sum_{i \neq j}^N \sum_{k \neq l}^N U(|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l|) \delta(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}'_i) \delta(\mathbf{x}_l - \mathbf{x}'_j) \\
& \times \sum_{(p)}'' \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_{p(1)}) \cdots \delta(\mathbf{x}_N - \mathbf{x}'_{p(N)}) \quad (2.64)
\end{aligned}$$

を得る. これを (2.59) に代入すると,

$$\begin{aligned}
& i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; t) \\
&= H_N \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; t) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l}^N U(|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l|) \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; t) \quad (2.65)
\end{aligned}$$

を得る．これは N 個の粒子が外場 $V(\mathbf{x})$ のもとで、ポテンシャル $U(|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l|)$ で相互作用している場合の Schrödinger 方程式にほかならない．

2.3.1 Heisenberg 表示

これまでの議論を Heisenberg 表示に書き直した場合、時間に依存する場の量

$$\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) = \exp(i\hat{H}t/\hbar)\hat{\varphi}(\mathbf{x})\exp(-i\hat{H}t/\hbar) \quad (2.66)$$

の運動方程式は

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) &= \exp(i\hat{H}t/\hbar)[\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{H}]\exp(-i\hat{H}t/\hbar) \\ &= \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right\} \hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) \\ &\quad + \int d\mathbf{x}' \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}', t)U(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)\hat{\varphi}(\mathbf{x}', t)\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (2.67)$$

となり、非線形である．したがってこの場の量を

$$\mathcal{H}\phi_l(\mathbf{x}) = \epsilon_l\phi_l(\mathbf{x}) \quad (2.68)$$

を満たす完全直交系で展開したとき、Bose 粒子系の場合

$$\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) = \sum_l \hat{a}_l(t)\phi_l(\mathbf{x})\exp(-i\epsilon_l t/\hbar) \quad (2.69)$$

Fermi 粒子系の場合

$$\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) = \sum_l \hat{c}_l(t)\phi_l(\mathbf{x})\exp(-i\epsilon_l t/\hbar) \quad (2.70)$$

のように消滅演算子 $\hat{a}_l(t)$ または $\hat{c}_l(t)$ が時間に依存する．ここで $\hat{a}_l(t)$ は Bose 交換関係

$$[\hat{a}_l(t), \hat{a}_\nu^\dagger(t)] = \delta_{l,\nu}, \quad [\hat{a}_l(t), \hat{a}_\nu(t)] = 0 \quad (2.71)$$

を満たし、 $\hat{c}_l(t)$ は Fermi 反交換関係

$$\{\hat{c}_l(t), \hat{c}_\nu^\dagger(t)\} = \delta_{l,\nu}, \quad \{\hat{c}_l(t), \hat{c}_\nu(t)\} = 0 \quad (2.72)$$

を満たす．

2.4 運動量表示

場の量子化については $\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t)$ を展開するとき、完全規格化直交関数系なら何をとっても展開は可能である。しばしば使われるのは、 $\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t)$ を Fourier 級数で展開することである。

一辺 L の立方体で、周期的境界条件の物理系では

$$\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \hat{a}_{\mathbf{k}}(t) \quad (2.73)$$

とすることができる ($V = L^3$)。ただし、

$$\mathbf{k} = \left(\frac{2\pi}{L} l_x, \frac{2\pi}{L} l_y, \frac{2\pi}{L} l_z \right), \quad (l_x, l_y, l_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (2.74)$$

(2.73) の逆変換は

$$\hat{a}_{\mathbf{k}}(t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int_V d\mathbf{x} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) \quad (2.75)$$

であるから、

$$\begin{aligned} [\hat{a}_{\mathbf{k}}(t), \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger(t)] &= \frac{1}{V} \int_V d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}') [\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t), \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}', t)] \\ &= \frac{1}{V} \int_V d\mathbf{x} \exp(-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}) \\ &= \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \end{aligned} \quad (2.76)$$

を得る。全く同様に

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}}(t), \hat{a}_{\mathbf{k}'}(t)] = 0 \quad (2.77)$$

も得られる。

今、 $t = 0$ において

$$\hat{a}_{\mathbf{k}} \equiv \hat{a}_{\mathbf{k}}(0) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int_V d\mathbf{x} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}, 0) \quad (2.78)$$

と書き、これを \hat{H} に入れると、

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \int_V d\mathbf{x} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \nabla \hat{\varphi}(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \right\} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\hbar \mathbf{k})^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{V}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (2.79)$$

ただし、

$$\tilde{V}(\mathbf{k}) = \frac{1}{V} \int_V d\mathbf{x} V(\mathbf{x}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \quad (2.80)$$

である。また、相互作用項については

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}} &= \frac{1}{2} \int_V d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}') U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\phi}(\mathbf{x}') \hat{\phi}(\mathbf{x}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{p}'} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{p}, \mathbf{k}'+\mathbf{p}'} \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \hat{a}_{\mathbf{p}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{p}} \end{aligned} \quad (2.81)$$

である。ここで、

$$\tilde{U}(\mathbf{k}) = \frac{1}{V} \int_V d\mathbf{x} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) U(\mathbf{x}) \quad (2.82)$$

である。

\hat{H}_0 と \hat{H}_{int} の物理的意味を見るには、状態ベクトル

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \prod_{l=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n_l!}} (\hat{a}_{\mathbf{k}_l}^\dagger)^{n_l} |0\rangle \quad (2.83)$$

にかけてみればよい。 \hat{H}_0 の第1項は $|n_1, n_2, \dots\rangle$ のうち運動量 $\hbar\mathbf{k}$ の粒子が一つ消え、続いて同じ運動量の粒子が一つ生成される。結果として状態は変わらない。 \hat{H}_0 の第2項では、運動量 $\hbar\mathbf{k}$ の粒子が一つ消え、運動量 $\hbar\mathbf{k}'$ の粒子が一つ生成される過程を表す。そのときポテンシャル \tilde{V} は、運動量 $\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ を受け取っているため、これは粒子が運動量 $\hbar\mathbf{k}$ の状態から $\hbar\mathbf{k}'$ の状態に散乱されたと考えることができる。

同様に \hat{H}_{int} では、運動量 $\hbar\mathbf{k}$ と $\hbar\mathbf{p}$ の2つの粒子が、ポテンシャル \tilde{U} により、それぞれ運動量 $\hbar\mathbf{k}'$ と $\hbar\mathbf{p}'$ の状態に散乱されたと解釈できる。

2.4.1 運動量演算子

ここで、量子化された場の運動量に対応する演算子を定義しておく。

$$\hat{P} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \frac{\hbar}{i} \{ \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \nabla \hat{\phi}(\mathbf{x}, t) - \nabla \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\phi}(\mathbf{x}, t) \} \quad (2.84)$$

\hat{P} は自己エルミート演算子 ($\hat{P}^\dagger = \hat{P}$) である。すると \hat{P} と場の演算子の交換関係は、boson の交換関係を使って、

$$[\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{P}] = \frac{\hbar}{i} \nabla \hat{\phi}(\mathbf{x}, t) \quad (2.85)$$

となる．いま \hat{P} の固有ベクトルを $|p\rangle$ とし、その固有値を p とする．

$$\hat{P}|p\rangle = p|p\rangle \quad (2.86)$$

すると (2.85) より

$$\langle p'|\hat{\phi}(\mathbf{x}, t)|p\rangle(\mathbf{p} - \mathbf{p}') = \frac{\hbar}{i}\nabla\langle p'|\hat{\phi}(\mathbf{x}, t)|p\rangle \quad (2.87)$$

(2.73) をこれに代入すると、

$$(\mathbf{p} - \mathbf{p}' - \hbar\mathbf{k})\langle p'|\hat{a}_{\mathbf{k}}(t)|p\rangle = 0 \quad (2.88)$$

したがって、 $\langle p'|\hat{a}_{\mathbf{k}}(t)|p\rangle \neq 0$ ならば、

$$\mathbf{p} - \mathbf{p}' = \hbar\mathbf{k} \quad (2.89)$$

これはよく知られた Einstein-de-Broglie の関係で、右辺は波数 k をもった量子の運動量である．したがって、 \hat{P} は運動量演算子と見てよい．なお、(2.73) を用いると

$$\hat{P} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\mathbf{k}\hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t)\hat{a}_{\mathbf{k}}(t) \quad (2.90)$$

となる。

2.5 場の量子化

2.5.1 実数場の量子化

波動方程式

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2\nabla^2 \right\} \phi(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (2.91)$$

を満たす実数の場 $\phi(\mathbf{x}, t)$ を考えよう．ここで c は波の速度である． $\phi(\mathbf{x}, t)$ を演算子とみなし、それが Heisenberg の運動方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\phi}(\mathbf{x}, t) = [\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{H}] \quad (2.92)$$

を満たすとして、 \hat{H} および $\hat{\phi}(\mathbf{x}, t)$ の演算規則を考察してみよう．

ところで、波動方程式 (2.91) は時間について2階の微分方程式だが、Heisenberg の運動方程式は時間について1階の微分方程式である。そこで $\hat{\Pi}(\mathbf{x}, t)$ という場を導入して、(2.91) を以下のように2つの1階微分方程式で書き直そう。

$$\frac{\partial \hat{\phi}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \hat{\Pi}(\mathbf{x}, t) \quad (2.93)$$

$$\frac{\partial \hat{\Pi}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = c^2 \nabla^2 \hat{\phi}(\mathbf{x}, t) \quad (2.94)$$

さらに、これらの場が1辺 L の立方体の中にはいていて、周期的境界条件を考え、 $\hat{\phi}(\mathbf{x}, t)$ と $\hat{\Pi}(\mathbf{x}, t)$ を Fourier 級数で表すと、

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \hat{q}_{\mathbf{k}}(t) \quad (2.95)$$

$$\hat{\Pi}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \hat{p}_{\mathbf{k}}(t) \quad (2.96)$$

ここで、 $\hat{\phi}(\mathbf{x}, t)$ と $\hat{\Pi}(\mathbf{x}, t)$ とは実数場であるから

$$\hat{q}_{\mathbf{k}}^\dagger(t) = \hat{q}_{-\mathbf{k}}(t), \quad \hat{p}_{\mathbf{k}}^\dagger(t) = \hat{p}_{-\mathbf{k}}(t) \quad (2.97)$$

でなければならない。(2.93), (2.94) を書き直すと、

$$\frac{d}{dt} \hat{q}_{\mathbf{k}}(t) = \hat{p}_{\mathbf{k}}^\dagger(t) \quad (2.98)$$

$$\frac{d}{dt} \hat{p}_{\mathbf{k}}(t) = -c^2 \mathbf{k}^2 \hat{q}_{\mathbf{k}}^\dagger(t) \quad (2.99)$$

つまり今扱っている系は、角振動数

$$\omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}| \quad (2.100)$$

をもった複素調和振動子の集まりである。したがって、以上の運動方程式を満たすハミルトニアンと、交換関係は

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{ \hat{p}_{\mathbf{k}}^\dagger(t) \hat{p}_{\mathbf{k}}(t) + \omega_{\mathbf{k}}^2 \hat{q}_{\mathbf{k}}^\dagger(t) \hat{q}_{\mathbf{k}}(t) \} \quad (2.101)$$

$$[\hat{p}_{\mathbf{k}}(t), \hat{q}_{\mathbf{k}'}(t)] = -i\hbar \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \quad (2.102)$$

$$[\hat{p}_{\mathbf{k}}(t), \hat{p}_{\mathbf{k}'}(t)] = [\hat{q}_{\mathbf{k}}(t), \hat{q}_{\mathbf{k}'}(t)] = 0 \quad (2.103)$$

となる。

2.5.2 物理的意味

次にその物理的意味を考察してみる。

まず、

$$\hat{a}_{\mathbf{k}}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left\{ \sqrt{\omega_{\mathbf{k}}} \hat{q}_{\mathbf{k}}(t) + \frac{i}{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}}} \hat{p}_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) \right\} \quad (2.104)$$

$$\hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left\{ \sqrt{\omega_{\mathbf{k}}} \hat{q}_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) - \frac{i}{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}}} \hat{p}_{\mathbf{k}}(t) \right\} \quad (2.105)$$

によって、生成消滅演算子を導入する。容易にわかるように

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}}(t), \hat{a}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}(t)] = \frac{1}{2\hbar} \{ \hbar \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} + \hbar \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \quad (2.106)$$

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}}(t), \hat{a}_{\mathbf{k}'}(t)] = [\hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t), \hat{a}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}(t)] = 0 \quad (2.107)$$

これを用いてハミルトニアンを書き直すと

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \left\{ \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) \hat{a}_{\mathbf{k}}(t) + \frac{1}{2} \right\} \quad (2.108)$$

かつ

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}}} \{ \hat{a}_{\mathbf{k}}(t) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \} \quad (2.109)$$

$$\hat{\Pi}(\mathbf{x}, t) = -\frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2}} \{ \hat{a}_{\mathbf{k}}(t) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) - \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \} \quad (2.110)$$

である。

ハミルトニアンを対角化する状態ベクトルは

$$\hat{H}|n_1, n_2, \dots\rangle = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} |n_1, n_2, \dots\rangle \quad (2.111)$$

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{n_{\mathbf{k}}!}} (\hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger})^{n_{\mathbf{k}}} |0\rangle \quad (2.112)$$

と書き下せる。

この Bose 粒子の集団の持つ運動量演算子は

$$-i\hbar\nabla\hat{\phi}(\mathbf{x},t) = [\hat{\phi}(\mathbf{x},t), \hat{\mathbf{P}}] \quad (2.113)$$

$$-i\hbar\nabla\hat{\Pi}(\mathbf{x},t) = [\hat{\Pi}(\mathbf{x},t), \hat{\mathbf{P}}] \quad (2.114)$$

を要求して定める．そのようなベクトル演算子は

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\mathbf{k}\hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t)\hat{a}_{\mathbf{k}}(t) \quad (2.115)$$

である。

$\hat{H}, \hat{\mathbf{P}}$ の場の量による表現

まとめとして、ハミルトニアン \hat{H} 、運動量 $\hat{\mathbf{P}}$ 、および交換関係を、場の量 $\hat{\phi}(\mathbf{x},t)$ と $\hat{\Pi}(\mathbf{x},t)$ で表すと

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \{ \hat{\Pi}(\mathbf{x},t)\hat{\Pi}(\mathbf{x},t) + c^2\nabla\hat{\phi}(\mathbf{x},t)\nabla\hat{\phi}(\mathbf{x},t) \} \quad (2.116)$$

$$\hat{\mathbf{P}} = - \int d\mathbf{x} \hat{\Pi}(\mathbf{x},t)\nabla\hat{\phi}(\mathbf{x},t) \quad (2.117)$$

$$[\hat{\phi}(\mathbf{x},t), \hat{\Pi}(\mathbf{x}',t)] = i\hbar\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (2.118)$$

$$[\hat{\phi}(\mathbf{x},t), \hat{\phi}(\mathbf{x}',t)] = 0 \quad (2.119)$$

これらを導くには、

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\mathbf{k}}(t) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}}} \int d\mathbf{x} \left\{ \omega_{\mathbf{k}}\hat{\phi}(\mathbf{x},t) + i\hat{\Pi}(\mathbf{x},t) \right\} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \\ \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}}} \int d\mathbf{x} \left\{ \omega_{\mathbf{k}}\hat{\phi}(\mathbf{x},t) - i\hat{\Pi}(\mathbf{x},t) \right\} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \end{aligned} \quad (2.120)$$

と表し、ハミルトニアン、運動量演算子に代入すれば良い．

エネルギー密度および運動量密度を

$$\hat{e}(\mathbf{x},t) = \frac{1}{2} \{ \hat{\Pi}(\mathbf{x},t)\hat{\Pi}(\mathbf{x},t) + c^2\nabla\hat{\phi}(\mathbf{x},t)\nabla\hat{\phi}(\mathbf{x},t) \} \quad (2.121)$$

$$\hat{\mathbf{p}}(\mathbf{x},t) = -\hat{\Pi}(\mathbf{x},t)\nabla\hat{\phi}(\mathbf{x},t) \quad (2.122)$$

と定義すると、連続の方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{e}(\mathbf{x},t) + c^2\nabla\hat{\mathbf{p}}(\mathbf{x},t) = 0 \quad (2.123)$$

が成り立つ．

2.5.3 複素場の波動方程式

今までは、 $\hat{\phi}(\mathbf{x}, t)$ が実の場 (Hermitic な場) を扱った。次に、 $\hat{\phi}(\mathbf{x}, t)$ が複素数の場を扱おう。

前と同様、Heisenberg の運動方程式

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\phi}(\mathbf{x}, t) &= [\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{H}] \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Pi}(\mathbf{x}, t) &= [\hat{\Pi}(\mathbf{x}, t), \hat{H}] \end{aligned} \quad (2.124)$$

と、これらの Hermitic 共役関係を出発点とする。
波動方程式

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2 \nabla^2 \right\} \hat{\phi}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (2.125)$$

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2 \nabla^2 \right\} \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (2.126)$$

を分解して

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\phi}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= \hat{\Pi}^\dagger(\mathbf{x}, t), & \frac{\partial \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= \hat{\Pi}(\mathbf{x}, t) \\ \frac{\partial \hat{\Pi}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= c^2 \nabla^2 \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t), & \frac{\partial \hat{\Pi}^\dagger(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= c^2 \nabla^2 \hat{\phi}(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (2.127)$$

とする。これらの方程式を与えるような \hat{H} と $\hat{\phi}(\mathbf{x}, t)$ の演算規則を求めると

$$\hat{H} = \int d\mathbf{x} \{ \hat{\Pi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\Pi}(\mathbf{x}, t) + c^2 \nabla \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \nabla \hat{\phi}(\mathbf{x}, t) \} \quad (2.128)$$

$$[\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{\Pi}(\mathbf{x}', t)] = [\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t), \hat{\Pi}^\dagger(\mathbf{x}', t)] = i\hbar \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (2.129)$$

$$[\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{\phi}(\mathbf{x}', t)] = [\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}', t)] = 0 \quad (2.130)$$

とすれば良い。

この場合、実数場に比べ自由度が2倍になっているから、生成消滅演

算子の数も2倍に増やしてやらなければならない．そこで、

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}}} \{ \hat{a}_{\mathbf{k}}(t) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \} \quad (2.131)$$

$$\hat{\Pi}(\mathbf{x}, t) = -\frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2}} \{ \hat{b}_{\mathbf{k}}(t) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) - \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \} \quad (2.132)$$

とおくと、交換関係は

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}}(t), \hat{a}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}(t)] = [\hat{b}_{\mathbf{k}}(t), \hat{b}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}(t)] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \quad (2.133)$$

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}}(t), \hat{a}_{\mathbf{k}'}(t)] = [\hat{b}_{\mathbf{k}}(t), \hat{b}_{\mathbf{k}'}(t)] = 0 \quad (2.134)$$

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}}(t), \hat{b}_{\mathbf{k}'}(t)] = [\hat{a}_{\mathbf{k}}(t), \hat{b}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}(t)] = 0 \quad (2.135)$$

によって満たされる．これは \hat{a}, \hat{b} がそれぞれ独立の消滅演算子になっていることを示す．これらでハミルトニアンを表すと

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) \hat{a}_{\mathbf{k}}(t) + \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) \hat{b}_{\mathbf{k}}(t) \quad (2.136)$$

運動量演算子は

$$-i\hbar\nabla\hat{\phi}(\mathbf{x}, t) = [\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{\mathbf{P}}] \quad (2.137)$$

$$-i\hbar\nabla\hat{\Pi}(\mathbf{x}, t) = [\hat{\Pi}(\mathbf{x}, t), \hat{\mathbf{P}}] \quad (2.138)$$

から

$$\hat{\mathbf{P}} = - \int d\mathbf{x} \left\{ \hat{\Pi}(\mathbf{x}, t) \nabla \hat{\phi}(\mathbf{x}, t) + \hat{\Pi}^{\dagger}(\mathbf{x}, t) \nabla \hat{\phi}^{\dagger}(\mathbf{x}, t) \right\} \quad (2.139)$$

となる．

エネルギー密度

$$\hat{e}(\mathbf{x}, t) = \hat{\Pi}^{\dagger}(\mathbf{x}, t) \hat{\Pi}(\mathbf{x}, t) + c^2 \nabla \hat{\phi}^{\dagger}(\mathbf{x}, t) \nabla \hat{\phi}(\mathbf{x}, t) \quad (2.140)$$

と運動量密度

$$\hat{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, t) = - \left\{ \hat{\Pi}(\mathbf{x}, t) \nabla \hat{\phi}(\mathbf{x}, t) + \hat{\Pi}^{\dagger}(\mathbf{x}, t) \nabla \hat{\phi}^{\dagger}(\mathbf{x}, t) \right\} \quad (2.141)$$

との間に、連続の方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{e}(\mathbf{x}, t) + c^2 \nabla \hat{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (2.142)$$

が成り立つ．

物理的意味

一つの波数 k に対して、2つの量 $\hat{a}_k(t)$ と $\hat{b}_k(t)$ が存在するのは、1つの波に二つの違った粒子が対応していることを意味する。

物理的意味の考察の手がかりとして、ベクトル量

$$\hat{j}(\mathbf{x}, t) = -i(1/\hbar)ec^2\{\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t)\nabla\hat{\phi}(\mathbf{x}, t) - \nabla\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t)\hat{\phi}(\mathbf{x}, t)\} \quad (2.143)$$

と、スカラー量

$$\hat{\rho}(\mathbf{x}, t) = i(1/\hbar)e\{\hat{\Pi}^\dagger(\mathbf{x}, t)\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t) - \hat{\Pi}(\mathbf{x}, t)\hat{\phi}(\mathbf{x}, t)\} \quad (2.144)$$

の間に、連続の方程式

$$\frac{\partial\hat{\rho}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla\hat{j}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (2.145)$$

が成立することに注意しよう。これらの量 $\hat{\rho}(\mathbf{x}, t)$, $\hat{j}(\mathbf{x}, t)$ はそれぞれ電荷密度、電流密度である。

$\hat{\rho}(\mathbf{x}, t)$ を全空間で積分して全電荷を求めてみると、

$$\hat{Q} = \int d\mathbf{x}\hat{\rho}(\mathbf{x}, t) = e \sum_k \{\hat{a}_k^\dagger(t)\hat{a}_k(t) - \hat{b}_k^\dagger(t)\hat{b}_k(t)\} \quad (2.146)$$

となる。 \hat{Q} と \hat{a} , \hat{b} の交換関係は

$$[\hat{a}_k(t), \hat{Q}] = e\hat{a}_k(t) \quad (2.147)$$

$$[\hat{b}_k(t), \hat{Q}] = -e\hat{b}_k(t) \quad (2.148)$$

となる。そこで \hat{Q} の固有ベクトルを $|q\rangle$ 、つまり

$$\hat{Q}|q\rangle = q|q\rangle \quad (2.149)$$

とすると

$$\hat{Q}\hat{a}_k(t)|q\rangle = \{[\hat{Q}, \hat{a}_k(t)] + \hat{a}_k(t)\hat{Q}\}|q\rangle = (q - e)\hat{a}_k(t)|q\rangle \quad (2.150)$$

また

$$\hat{Q}\hat{b}_k(t)|q\rangle = (q - (-e))\hat{b}_k(t)|q\rangle \quad (2.151)$$

を得るから、 $\hat{a}_k(t)$ は電荷 e を一つ消す演算子であり、 $\hat{b}_k(t)$ は電荷 $-e$ を一つ消す演算子であることがわかる。同様に $\hat{a}_k^\dagger(t)$ は電荷 e を一つ生成する演算子であり、 $\hat{b}_k^\dagger(t)$ は電荷 $-e$ を一つ生成する演算子である。

2.6 体積無限大の極限

体積無限大の極限 $V \rightarrow \infty$ について整理する。よく知られた公式

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{(2\pi)^3}{V} \sum_{\mathbf{k}} = \int d\mathbf{k} \quad (2.152)$$

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{V}{(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (2.153)$$

を用いる。この時、

$$\begin{aligned} \lim_{V \rightarrow \infty} \left(\frac{V}{(2\pi)^3} \right)^{1/2} \hat{a}_{\mathbf{k}} &= \hat{a}(\mathbf{k}) \\ \lim_{V \rightarrow \infty} \left(\frac{V}{(2\pi)^3} \right)^{1/2} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger &= \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (2.154)$$

によって、連続なラベル \mathbf{k} をもつ生成消滅演算子を定義すると、

$$\begin{aligned} [\hat{a}(\mathbf{k}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}')] &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{V}{(2\pi)^3} [\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger] \\ &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{V}{(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \\ &= \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \end{aligned} \quad (2.155)$$

となる。場の量は

$$\begin{aligned} \hat{\phi}(\mathbf{x}, t) &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}}} (\hat{a}_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega_{\mathbf{k}}t) + \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + i\omega_{\mathbf{k}}t)) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\mathbf{k} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}}} (\hat{a}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega_{\mathbf{k}}t) + \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + i\omega_{\mathbf{k}}t)) \end{aligned} \quad (2.156)$$

また、

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \\ &= \int d\mathbf{k} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) \hat{a}(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (2.157)$$

2.7 コヒーレント状態

量子光学や Bose-Einstein 凝縮（ヘリウムの超流動、レーザー冷却したアルカリ金属での BEC、超伝導）で重要になるコヒーレント状態について説明する．粒子数 N が巨視的な場合、 $N \gg \sqrt{N} \gg 1$ では粒子数と位相の揺らぎが十分小さい状態を作ることができる．

2.7.1 コヒーレント状態とユニタリー変換

次のユニタリー演算子

$$\hat{D}(z) = \exp(z\hat{a}^\dagger - z^*\hat{a}) \quad (2.158)$$

(z は複素数) をとると、Baker-Hausdorff の補助定理 (A.17) から

$$\hat{D}^\dagger(z)\hat{a}\hat{D}(z) = \hat{a} + z, \quad \hat{D}^\dagger(z)\hat{a}^\dagger\hat{D}(z) = \hat{a}^\dagger + z^* \quad (2.159)$$

となる。

これから、

$$\hat{a}\hat{D}(z)|0\rangle = z\hat{D}(z)|0\rangle \quad (2.160)$$

となる。つまり、 $|z\rangle \equiv \hat{D}(z)|0\rangle$ は消滅演算子に対する規格化された固有状態であり、これをコヒーレント状態と呼ぶ。

$$\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle \quad (2.161)$$

のエルミート共役をとると、

$$\langle z|\hat{a}^\dagger = z^*\langle z| \quad (2.162)$$

であるので、

$$\langle z|\hat{a}|z\rangle = z, \quad \langle z|\hat{a}^\dagger|z\rangle = z^*, \quad (2.163)$$

となる。

さらにコヒーレント状態での個数の揺らぎを考えてみよう。まず、 $\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$ に対し、コヒーレント状態での個数の期待値は

$$n \equiv \langle z|\hat{n}|z\rangle = |z|^2 \quad (2.164)$$

である。なお、個数の期待値はエネルギー E に比例するので、古典的な場合と同じくエネルギーは振幅の 2 乗に比例する。また

$$\langle z|(\hat{n})^2|z\rangle = |z|^4 + |z|^2 \quad (2.165)$$

となるとなるので、個数の揺らぎは $\Delta n = |z|$ である。個数の揺らぎを、個数の期待値を用いて表現すると、 $\Delta n = n^{1/2}$ である。

2.7.2 コヒーレント状態の非直交性と完全性

消滅演算子は自己エルミートではなかったため、その固有状態は必ずしも直交系を構成しない。しかし、完全性は成り立つ。

Baker-Campbell-Hausdorff の公式 (A.18) を用いて、

$$\hat{D}(z) = \exp(z\hat{a}^\dagger - z^*\hat{a}) = \exp(-|z|^2/2) \exp(z\hat{a}^\dagger) \exp(-z^*\hat{a}) \quad (2.166)$$

が示される。これからコヒーレント状態は

$$|z\rangle = \exp(-|z|^2/2) \exp(z\hat{a}^\dagger)|0\rangle \quad (2.167)$$

とも表すことが出来る。従って個数表示では、

$$|z\rangle = \exp(-|z|^2/2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (2.168)$$

となる。

これからコヒーレント状態同士の内積について

$$\langle z|z'\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|z|^2 - \frac{1}{2}|z'|^2 + z^*z'\right) \quad (2.169)$$

が成り立ち、コヒーレント状態は直交系を作らない。しかし、

$$|\langle z|z'\rangle|^2 = \exp(-|z - z'|^2) \quad (2.170)$$

なので、 z と z' の差が大きい時には近似的に直交する。

コヒーレント状態は

$$\frac{1}{\pi} \int |z\rangle \langle z| d^2z = 1 \quad (2.171)$$

のように完全系をなす。

コヒーレント状態のように完全系をなしているが、直交性を満たさない系のことを過剰完全系 (overcomplete set) という。

第3章 素励起

3.1 フォノン

結晶の格子点にある原子またはイオンは、基底状態では(零点振動は別として)平衡の位置に静止している。外から何らかの擾乱が加わると、各原子またはイオンは互いに相互作用しながら複雑な連成振動をする

3.1.1 1次元調和振動子

結晶振動を一般的に扱うのは、記号が複雑になって分かりにくくなるので、もっとも単純な例として1次元の問題を取り上げる。

1次元の結晶振動を考える。質量 m の原子が間隔 a で並んでいるものとし、最近接原子間は弾性定数 K のバネでつながっているとす。このハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \sum_{l=0}^{N-1} (\hat{p}_l)^2 + \frac{1}{2} K \sum_{l=0}^{N-1} (\hat{u}_l - \hat{u}_{l+1})^2 \quad (3.1)$$

で表される。ここで \hat{u}_l は l 番目の原子またはイオンの平衡の位置からのずれ、 \hat{p}_l は対応する運動量演算子である。また、系は N 個の原子からなり、系全体の長さは $L = Na$ で、周期的境界条件

$$\hat{u}_{l+N} = \hat{u}_l, \quad \hat{p}_{l+N} = \hat{p}_l \quad (3.2)$$

を満たすものとする。

自己エルミートな演算子 \hat{u}_l と \hat{p}_l は以下の交換関係を満たすものとする。

$$[\hat{u}_l, \hat{p}_{l'}] = i\hbar\delta_{l,l'}, \quad [\hat{u}_l, \hat{u}_{l'}] = [\hat{p}_l, \hat{p}_{l'}] = 0 \quad (3.3)$$

\hat{u}_l と \hat{p}_l を Fourier 変換したものを

$$\hat{U}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=0}^{N-1} \exp(ikla)\hat{u}_l, \quad \hat{P}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=0}^{N-1} \exp(-ikla)\hat{p}_l \quad (3.4)$$

ととる .

Fourier 逆変換から

$$\hat{u}_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(-ikla) \hat{U}_k, \quad \hat{p}_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(ikla) \hat{P}_k \quad (3.5)$$

とあらわされる .

ここで , 周期的境界条件 (3.2) ($\hat{u}_{l+N} = \hat{u}_l, \hat{p}_{l+N} = \hat{p}_l$) から

$$\exp(ikNa) = 1 \quad (3.6)$$

すなわち波数 k は

$$k = \frac{2\pi n}{Na} = \frac{2\pi n}{L}, \quad (n \text{ は整数}) \quad (3.7)$$

でなければならない. また , k を $k + 2\pi/a$ としても関係は変わらないので , 独立な波数を

$$-\frac{\pi}{a} \leq k < \frac{\pi}{a} \quad (3.8)$$

の範囲にとる (ブリュアンゾーン (Brillouin zone)) .

\hat{U}_k と $\hat{P}_{k'}$ の交換関係は

$$\begin{aligned} [\hat{U}_k, \hat{P}_{k'}] &= \frac{1}{N} \sum_{l,l'} \exp(i(kl - k'l')a) [\hat{u}_l, \hat{p}_{l'}] \\ &= \frac{i\hbar}{N} \sum_l \exp(i(k - k')la) \\ &= i\hbar \delta_{k,k'}, \\ [\hat{U}_k, \hat{U}_{k'}] &= \frac{1}{N} \sum_l \exp(i(kl - k'l')a) [\hat{u}_l, \hat{u}_{l'}] = 0, \\ [\hat{P}_k, \hat{P}_{k'}] &= 0 \end{aligned} \quad (3.9)$$

ここで , 有限 Fourier 級数の公式 $\sum_{l=0}^{N-1} \exp(i(k - k')la) = N\delta_{k,k'}$ (cf. (B.1)) をつかった .

ただし , ここで注意すべきことであるが , \hat{U}_k と $\hat{P}_{k'}$ は自己エルミートな演算子ではない .

$$\begin{aligned} \hat{U}_k^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l \exp(-ikla) \hat{u}_l^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l \exp(-ikla) \hat{u}_l = \hat{U}_{-k}, \\ \hat{P}_k^\dagger &= \hat{P}_{-k} \end{aligned} \quad (3.10)$$

すると

$$\begin{aligned}
\sum_{l=0}^{N-1} (\hat{p}_l)^2 &= \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} \left(\sum_{k'} \exp(ik'la) \hat{P}_{k'} \right) \left(\sum_k \exp(ikla) \hat{P}_k \right) \\
&= \frac{1}{N} \sum_k \sum_{k'} \sum_{l=0}^{N-1} \exp(i(k+k')la) \hat{P}_{k'} \hat{P}_k \\
&= \sum_k \sum_{k'} \delta_{k,-k'} \hat{P}_{k'} \hat{P}_k \\
&= \sum_k \hat{P}_{-k} \hat{P}_k \tag{3.11}
\end{aligned}$$

同様にして，

$$\begin{aligned}
&\sum_{l=0}^{N-1} (\hat{u}_l - \hat{u}_{l+1})^2 \\
&= \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} \left(\sum_{k'} \hat{U}_{k'} \exp(-ik'la) (1 - \exp(-ik'a)) \right) \left(\sum_k \hat{U}_k \exp(-ikla) (1 - \exp(-ik'a)) \right) \\
&= \frac{1}{N} \sum_k \sum_{k'} (1 - \exp(-ik'a)) (1 - \exp(-ika)) \hat{U}_{k'} \hat{U}_k \sum_{l=0}^{N-1} \exp(-i(k+k')la) \\
&= \sum_k \sum_{k'} \delta_{k,-k'} (1 - \exp(-ik'a)) (1 - \exp(-ika)) \hat{U}_{k'} \hat{U}_k \\
&= \sum_k 2(1 - \cos ka) \hat{U}_{-k} \hat{U}_k \tag{3.12}
\end{aligned}$$

結局，ハミルトニアン (3.1) は

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_k \left\{ \frac{1}{m} \hat{P}_k^\dagger \hat{P}_k + G(k) \hat{U}_k^\dagger \hat{U}_k \right\} \tag{3.13}$$

と言う調和振動子の形に帰着する．ここで

$$G(k) = 2K(1 - \cos ka) \tag{3.14}$$

波数 k のモードの振動数は

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{G(k)}{m}} = 2\sqrt{\frac{K}{m}} \sin\left(\frac{1}{2}ka\right) \tag{3.15}$$

である．

最後に演算子を

$$\hat{a}_k = (2\hbar\omega_k m)^{-1/2} [\hat{P}_k - im\omega_k \hat{U}_k^\dagger], \quad \hat{a}_k^\dagger = (2\hbar\omega_k m)^{-1/2} [\hat{P}_k^\dagger + im\omega_k \hat{U}_k] \quad (3.16)$$

で導入する．その交換関係は

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] = \delta_{k,k'}, \quad [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}] = 0 \quad (3.17)$$

であることが確かめられる．また，

$$\begin{aligned} \hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger &= (2\hbar\omega_k m)^{-1/2} (\hat{P}_k - im\omega_k \hat{U}_k^\dagger + \hat{P}_{-k}^\dagger + im\omega_{-k} \hat{U}_{-k}) \\ &= \sqrt{\frac{2}{\hbar\omega_k m}} \hat{P}_k \end{aligned} \quad (3.18)$$

(ここで $\hat{U}_k^\dagger = \hat{U}_{-k}$, $\hat{P}_k^\dagger = \hat{P}_{-k}$) および, $\omega(-k) = \omega(k)$ を使った) と

$$\begin{aligned} \hat{a}_k - \hat{a}_{-k}^\dagger &= (2\hbar\omega_k m)^{-1/2} (\hat{P}_k - im\omega_k \hat{U}_k^\dagger - \hat{P}_{-k}^\dagger - im\omega_{-k} \hat{U}_{-k}) \\ &= -i\sqrt{\frac{2\omega_k m}{\hbar}} \hat{U}_{-k} \end{aligned} \quad (3.19)$$

より, ハミルトニアン (3.13) は

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_k \hbar\omega_k (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger) = \sum_k \hbar\omega_k (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{2}) \quad (3.20)$$

となる．

3.1.2 高次元

高次元でも1次元と同様な手続きで固体振動を量子化してフォノンが得られる．

ただしフォノンの内部自由度から, 縦波と横波がでる．

また, 次元によって状態密度が異なるので, 低温での比熱などの挙動は異なる．

3.2 フェルミオン

3.2.1 自由電子気体

以下、体積 V の金属中の電子を考えるが、イオンによるポテンシャルの影響、および電子間の Coulomb 相互作用を一応無視する。すなわち電子はこの場合平面波で表される。これにさらにスピン上向きと下向きの両方の自由度を考慮するためには、電子の場として2つの成分を持った量 $\hat{\varphi}_\sigma(\mathbf{x}, t)$, $\sigma = 1, 2$ を用いなければならない。

この系のハミルトニアンは

$$\hat{H}_0 = \int d\mathbf{x} \sum_{\sigma} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \hat{\varphi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}, t) \nabla \hat{\varphi}_{\sigma}(\mathbf{x}, t) \quad (3.21)$$

となる。また、反交換関係は

$$\begin{aligned} \{\hat{\varphi}_{\sigma}(\mathbf{x}, t), \hat{\varphi}_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{x}', t)\} &= \delta_{\sigma, \sigma'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\ \{\hat{\varphi}_{\sigma}(\mathbf{x}, t), \hat{\varphi}_{\sigma'}(\mathbf{x}', t)\} &= 0 \end{aligned} \quad (3.22)$$

である。 $\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t)$ の運動方程式は

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\varphi}_{\sigma}(\mathbf{x}, t) &= [\hat{\varphi}_{\sigma}(\mathbf{x}, t), \hat{H}_0] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{\varphi}_{\sigma}(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (3.23)$$

基準座標と場の量子化

この場合は場がスピンに関係した添字 $\sigma = 1, 2$ を持っており、運動方程式は $\sigma = 1, 2$ について独立だからスピンに関係する演算子を持ってきて、それを対角化するような表示を導入すると都合がよい。通常は電子のスピン第3成分の演算子

$$\hat{s}_3 = \frac{1}{2} \hat{\sigma}_3 \quad (3.24)$$

を対角化する表示を取る。ここで $\hat{\sigma}_3$ は2行2列の Pauli のスピン演算子である。

$$\hat{\varphi}_{\sigma}(\mathbf{x}, t) \sim u_{\sigma} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) \exp(-i\epsilon t/\hbar) \quad (3.25)$$

とおくと、

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2 \quad (3.26)$$

である。

また、 u_σ として、 \hat{s}_3 を対角化するようにとる。すなわち、

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma'=1,2} (s_3)_{\sigma,\sigma'} u_{\sigma'}(\uparrow) &= \frac{1}{2} u_\sigma(\uparrow) \\ \sum_{\sigma'=1,2} (s_3)_{\sigma,\sigma'} u_{\sigma'}(\downarrow) &= -\frac{1}{2} u_\sigma(\downarrow) \end{aligned} \quad (3.27)$$

ととる。これを用いて $\hat{\varphi}_\sigma(\mathbf{x}, t)$ を展開すると

$$\hat{\varphi}_\sigma(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \{ \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} u_\sigma(\uparrow) + \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow} u_\sigma(\downarrow) \} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \exp(-i\epsilon(\mathbf{k})t/\hbar) \quad (3.28)$$

となる。

反交換関係は

$$\begin{aligned} \{ \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}, \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \} &= \{ \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}, \hat{c}_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \\ \{ \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}, \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow} \} &= \{ \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}, \hat{c}_{\mathbf{k}'\downarrow} \} = 0 \\ \{ \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}, \hat{c}_{\mathbf{k}'\downarrow} \} &= \{ \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}, \hat{c}_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \} = 0 \end{aligned} \quad (3.29)$$

となる。

また、スピンの固有状態は

$$\sum_{\sigma=1,2} u_\sigma^*(l) u_\sigma(l') = \delta_{ll'} \quad (3.30)$$

と規格化しておく。

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) (\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}) \quad (3.31)$$

ハミルトニアンは全電子数が 0 から ∞ までの色々な系を含んでいるが、物性論で重要なのはこの全系では無く、電子の総数がある数 N に限られた場合である。

$$\begin{aligned} \hat{N} &= \int d\mathbf{x} \sum_{\sigma} \hat{\varphi}_\sigma^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\varphi}_\sigma(\mathbf{x}, t) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} (\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}) \end{aligned} \quad (3.32)$$

ハミルトニアン of 最低固有値

電子には Pauli の排他律があるため、すべての電子が同じエネルギー 0 の状態に落ち込むことはできない。エネルギーの一番低い状態にスピンの相異なった 2 つの電子が落ち込み、つぎに、その次にエネルギーの低い状態にスピンの相異なった 2 つの電子が落ち込み、… という具合に、各エネルギー状態に下から順次 2 つずつの電子が入り込む。

このとき最後の電子のエネルギーを ϵ_F とし、それに対応する電子の波数ベクトルの大きさを k_F (これを Fermi 波数という) とすると

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}(k_F)^2 \quad (3.33)$$

である。 $|\mathbf{k}| \leq k_F$ の波数ベクトルを持つ電子の各状態が全て埋めつくされている状態は、

$$\Phi_F = \prod_{|\mathbf{k}| < k_F} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle \quad (3.34)$$

であたえられる。ただし、真空状態 $|0\rangle$ は

$$\langle 0|0\rangle = 1, \quad \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}|0\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}|0\rangle = 0 \quad (3.35)$$

を満たすとする。

$$\begin{aligned} \hat{N}\Phi_F &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{l=\uparrow,\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k},l}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},l} \Phi_F \\ &= \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} 2\Phi_F \\ &= \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_{|\mathbf{k}| < k_F} d\mathbf{k} \Phi_F \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{8\pi}{3} k_F^3 \Phi_F \end{aligned} \quad (3.36)$$

したがって

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}, \quad n = N/V \quad (3.37)$$

を得る。ここで n は電子の密度である。

$$\begin{aligned} \hat{H}_0\Phi_F &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{l=\uparrow,\downarrow} \epsilon(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k},l}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},l} \Phi_F \\ &= \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} 2\epsilon(\mathbf{k}) \Phi_F \end{aligned} \quad (3.38)$$

したがって

$$\begin{aligned}
 E_0 &= \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} 2 \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k})^2 \\
 &= \frac{\hbar^2}{m} \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{|\mathbf{k}| < k_F} d\mathbf{k} k^2 \\
 &= \frac{\hbar^2}{m} \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{5} k_F^5 \\
 &= \frac{3}{5} N \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \\
 &= \frac{3}{5} N \epsilon_F
 \end{aligned} \tag{3.39}$$

となる。波数ベクトル空間で k_F を半径とする球面を Fermi 面と呼ぶ。

エネルギーの定義の変更

このように粒子数の固定された Fermi 粒子系では最低エネルギーは E_0 であり、それに対応する状態は Φ_F であるから、エネルギーを

$$\hat{H}_0 \equiv \hat{H}_0 - \epsilon_F \hat{N} \tag{3.40}$$

と定義しなおすと便利である。

この場合、

$$\hat{\varphi}_\sigma(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \{ \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} u_\sigma(\uparrow) + \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow} u_\sigma(\downarrow) \} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \exp(-i(\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon_F)t/\hbar) \tag{3.41}$$

と展開しなおさなければならない。

さて $|\mathbf{k}| < k_F$ では $\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon_F$ は負になるので、それをエネルギーと解釈するのは無理である。ところがこのハミルトニアンを書き直してみると、

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_0 &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{l=\uparrow, \downarrow} \{ \epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon_F \} \hat{c}_{\mathbf{k}, l}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, l} \\
 &= \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} \sum_{l=\uparrow, \downarrow} \{ \epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon_F \} \hat{c}_{\mathbf{k}, l}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, l} + \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} \sum_{l=\uparrow, \downarrow} \{ \epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon_F \} \hat{c}_{\mathbf{k}, l}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, l} \\
 &= \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} \sum_{l=\uparrow, \downarrow} \{ \epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon_F \} \hat{c}_{\mathbf{k}, l}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, l} + \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} \sum_{l=\uparrow, \downarrow} \{ \epsilon_F - \epsilon(\mathbf{k}) \} (\hat{c}_{\mathbf{k}, l} \hat{c}_{\mathbf{k}, l}^\dagger - 1)
 \end{aligned} \tag{3.42}$$

となる．そこで $l = \uparrow, \downarrow$ に対して $\bar{l} = \downarrow, \uparrow$ として

$$\hat{c}_{\mathbf{k},l} = \begin{cases} \hat{\alpha}_{\mathbf{k},l} & (|\mathbf{k}| > k_F) \\ \hat{\beta}_{-\mathbf{k},\bar{l}}^\dagger & (|\mathbf{k}| \leq k_F) \end{cases} \quad (3.43a)$$

$$\hat{c}_{\mathbf{k},l}^\dagger = \begin{cases} \hat{\alpha}_{\mathbf{k},l}^\dagger & (|\mathbf{k}| > k_F) \\ \hat{\beta}_{-\mathbf{k},\bar{l}} & (|\mathbf{k}| \leq k_F) \end{cases} \quad (3.43b)$$

によって新しい演算子 $\hat{\alpha}, \hat{\beta}$ を定義すると、

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} \{\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon_F\} (\hat{\alpha}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{\alpha}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}\downarrow}) \\ &+ \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} \{\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{k})\} (\hat{\beta}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{\beta}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}\downarrow} - 2) \end{aligned} \quad (3.44)$$

ここで、 $\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon(-\mathbf{k})$ という関係を用いた．

正孔

$\hat{\alpha}$ と $\hat{\beta}$ の物理的意味は、電荷の性質を調べてみるとさらにはっきりする．そのために、

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}_\sigma(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{l=\uparrow, \downarrow} \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}l} u_\sigma(l) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \exp(-i(\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon_F)t/\hbar) \\ &+ \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\bar{l}=\uparrow, \downarrow} \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} \hat{\beta}_{\mathbf{k}\bar{l}}^\dagger u_\sigma(\bar{l}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \exp(i(\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{k}))t/\hbar) \end{aligned} \quad (3.45)$$

となるが、これを用いて電子系の全電荷 \hat{Q} を書くと (電子の電荷 $-e$)

$$\begin{aligned} \hat{Q} &= -e \int d\mathbf{x} \sum_{\sigma=1,2} \hat{\varphi}_\sigma^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\varphi}_\sigma(\mathbf{x}, t) \\ &= -e \sum_{l=\uparrow, \downarrow} \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}l}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}l} + e \sum_{l=\uparrow, \downarrow} \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} \hat{\beta}_{\mathbf{k}l}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}l} \\ &- e \sum_{l=\uparrow, \downarrow} \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} 1 \end{aligned} \quad (3.46)$$

ところで、全電荷の演算子の交換関係を調べると、

$$\begin{aligned} [\hat{Q}, \hat{\alpha}_{kl}^\dagger] &= (-e)\hat{\alpha}_{kl}^\dagger \\ [\hat{Q}, \hat{\beta}_{kl}^\dagger] &= e\hat{\beta}_{kl}^\dagger \end{aligned} \quad (3.47)$$

が成り立つから、 $\hat{\alpha}_{kl}^\dagger$ は電荷 $(-e)$ を生成させる演算子、 $\hat{\beta}_{kl}^\dagger$ は電荷 e を生成させる演算子である。

$$\begin{aligned} \langle q' | [\hat{Q}, \hat{\alpha}_{kl}^\dagger] | q \rangle &= (q' - q) \langle q' | \hat{\alpha}_{kl}^\dagger | q \rangle \\ &= -e \langle q' | \hat{\alpha}_{kl}^\dagger | q \rangle \end{aligned} \quad (3.48)$$

したがって、 $\langle q' | \hat{\alpha}_{kl}^\dagger | q \rangle \neq 0$ なのは

$$q' = q - e \quad (3.49)$$

のとき、言い替えると q' は q より $-e$ だけ増えている。

結局、(3.46) の全電荷 \hat{Q} の第1項は電荷 $-e$ 、エネルギー $\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon_F$ を持った電子による項、第2項は電荷 e エネルギー $\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{k}) (> 0)$ を持った粒子による項、最後の項は電子が全て Fermi 面内にあるときの電荷である。この電荷 e エネルギー $\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{k})$ の粒子を正孔 (positive hole) という。

3.3 マグノン

この節ではスピンの相互作用する系を扱う。

まず、スピン演算子の交換関係はボソンの交換関係ともフェルミオンの反交換関係とも異なるのでこれを整理しておく。スピン演算子の交換関係は、角運動量演算子の交換関係と同じ形で

$$[\hat{S}^x, \hat{S}^y] = i\hbar\hat{S}^z, \quad [\hat{S}^y, \hat{S}^z] = i\hbar\hat{S}^x, \quad [\hat{S}^z, \hat{S}^x] = i\hbar\hat{S}^y \quad (3.50)$$

である。

それぞれ

$$\hat{S}^+ \equiv \hat{S}^x + i\hat{S}^y, \quad \hat{S}^- \equiv \hat{S}^x - i\hat{S}^y, \quad (3.51)$$

で定義される昇降演算子を導入すると便利である。これらの交換関係は

$$[\hat{S}^z, \hat{S}^\pm] = \pm\hbar\hat{S}^\pm, \quad (3.52a)$$

$$[\hat{S}^+, \hat{S}^-] = 2\hbar\hat{S}^z, \quad (3.52b)$$

である。

3.3.1 1次元スピン系

簡単のため1次元格子でのスピン系を考える．格子のラベルを j として， j 番目の格子点でのスピン演算子を \hat{S}_j とする．異なる格子のスピン演算子は互いに交換するものとする．つまり交換関係は

$$[\hat{S}_j^x, \hat{S}_{j'}^y] = i\delta_{j,j'}\hbar\hat{S}_j^z, \quad [\hat{S}_j^y, \hat{S}_{j'}^z] = i\delta_{j,j'}\hbar\hat{S}_j^x, \quad [\hat{S}_j^z, \hat{S}_{j'}^x] = i\delta_{j,j'}\hbar\hat{S}_j^y, \quad (3.53)$$

または

$$[\hat{S}_j^z, \hat{S}_{j'}^\pm] = \pm\delta_{j,j'}\hbar\hat{S}_j^\pm, \quad (3.54a)$$

$$[\hat{S}_j^+, \hat{S}_{j'}^-] = 2\delta_{j,j'}\hbar\hat{S}_j^z, \quad (3.54b)$$

である．

1次元スピン系のハミルトニアンとして

$$\hat{H} = J \sum_{i=1}^N \hat{S}_i \cdot \hat{S}_{i+1} \quad (3.55)$$

を扱おう． $J < 0$ の時に強磁性， $J > 0$ の時に反強磁性である．これは昇降演算子を用いて

$$\hat{H} = J \sum_{i=1}^N \left[\hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z + \frac{1}{2} (\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_{i+1}^+) \right] \quad (3.56)$$

と書き直すこともできる．

もう一つ，重要な演算子として

$$\hat{S}_T^z \equiv \sum_i \hat{S}_i^z \quad (3.57)$$

を導入する．これは上記のハミルトニアンと交換する．

3.3.2 強磁性基底状態

議論を簡単にするため $S=1/2$ のスピン系を考える．特定のサイトのスピン状態を， $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ であらわすことにする．ここで $\hat{S}^z|\pm\rangle = \pm\hbar/2|\pm\rangle$ である．これを使って例えば6個のスピン状態は

$$|++--+-\rangle$$

といった形の線形結合で表現できる．この場合独立な基底は 2^6 個ある．
一般に N 個のスピンでは 2^N 個の独立な基底がある．

格子上のスピンがすべて上向きの状態をとる．

$$|FF\rangle \equiv |++++\dots++\rangle \quad (3.58)$$

するとこれはハミルトニアン固有状態であり，強磁性の場合には基底状態でもある．

$$\hat{H}|FF\rangle = J \sum_{i=1}^N \left[\hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z + \frac{1}{2} (\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_{i+1}^+) \right] |FF\rangle \quad (3.59)$$

まず $\hat{S}_i^z |FF\rangle = \frac{1}{2} |FF\rangle$ なので， $\hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z |FF\rangle = \frac{1}{4} |FF\rangle$ である．次に $\hat{S}_i^+ |FF\rangle = 0$ および $\hat{S}_{i+1}^+ |FF\rangle = 0$ である．したがって $\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- |FF\rangle = 0$ および $\hat{S}_i^- \hat{S}_{i+1}^+ |FF\rangle = 0$ である．以上から

$$\hat{H}|FF\rangle = J \sum_i \left[\frac{1}{4} |FF\rangle + 0 |FF\rangle \right] = \frac{JN}{4} |FF\rangle \quad (3.60)$$

つまり， $|FF\rangle$ はこのハミルトニアンの固有状態で固有値は $\frac{JN}{4}$ である．特に強磁性 ($J < 0$) ではこれは基底状態になり，基底状態のエネルギーは $E_{FF} = \frac{JN}{4}$ である．

1 マグノン状態

次に一つだけスピンの反転した状態を考える．

$$\begin{aligned} | - + + + \dots + \rangle &\equiv |1\rangle \\ | + - + + \dots + \rangle &\equiv |2\rangle \\ | + + - + \dots + \rangle &\equiv |3\rangle \quad \text{etc.} \end{aligned} \quad (3.61)$$

j 番目のスピンの反転した状態を

$$| + \dots + - + \dots + \rangle \equiv |j\rangle \quad (3.62)$$

と定義する．このとき

$$\begin{aligned} \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z |j\rangle &= \frac{1}{4} |j\rangle & \text{if } j \neq i, i+1 \\ &= -\frac{1}{4} |j\rangle & \text{if } j = i, i+1 \end{aligned} \quad (3.63)$$

したがって

$$\sum_j \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z |j\rangle = \left[(N-2) \frac{1}{4} + 2 \left(-\frac{1}{4} \right) \right] |j\rangle = \left(\frac{N}{4} - 1 \right) |j\rangle \quad (3.64)$$

次に $\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^-$ の項の作用を考慮する．まず

$$\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- |j\rangle = 0 \quad \text{for } i \neq j \quad (3.65)$$

$i = j$ ならば

$$\begin{aligned} \hat{S}_j^+ \hat{S}_{j+1}^- |j\rangle &= \hat{S}_{j+1}^- |FF\rangle \\ &= |j+1\rangle \end{aligned} \quad (3.66)$$

したがって $\sum_i \hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- |j\rangle = |j+1\rangle$ である．同様にして

$$\sum_i \hat{S}_i^- \hat{S}_{i+1}^+ |j\rangle = |j-1\rangle \quad (3.67)$$

以上をまとめて

$$\begin{aligned} \hat{H}|j\rangle &= J \left[\left(\frac{N}{4} - 1 \right) |j\rangle + \frac{1}{2} |j-1\rangle + \frac{1}{2} |j+1\rangle \right] \\ &= E_g |j\rangle + J \left[\frac{1}{2} |j-1\rangle + \frac{1}{2} |j+1\rangle - |j\rangle \right] \end{aligned} \quad (3.68)$$

\hat{H} の固有状態を

$$|\psi\rangle \equiv \sum_j f_j |j\rangle \quad (3.69)$$

(f_j は係数) としよう．固有値方程式は

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (3.70)$$

したがって

$$\begin{aligned} \hat{H} \sum_j f_j |j\rangle &= \sum_j f_j \hat{H} |j\rangle \\ &= \sum_j E_{FF} f_j |j\rangle + \sum_j f_j J \left[\frac{1}{2} |j-1\rangle + \frac{1}{2} |j+1\rangle - |j\rangle \right] \\ &= E \sum_j f_j |j\rangle \end{aligned} \quad (3.71)$$

左から $\langle l|$ をかけて、正規直交関係 $\langle l|j\rangle = \delta_{l,j}$ を用いると

$$J \left[\frac{1}{2} f_{l+1} + \frac{1}{2} f_{l-1} - f_l \right] = (E - E_{FF}) f_l = \epsilon f_l \quad (3.72)$$

が得られる．ここで $\epsilon = E - E_{FF}$ は励起エネルギーである．
平面波の形

$$f_l = c_k \exp(ikl) \quad (c_k \text{係数}) \quad (3.73)$$

を (3.72) に代入すると

$$J \left[\frac{1}{2} c_k \exp(ik(l+1)) + \frac{1}{2} c_k \exp(ik(l-1)) - c_k \exp(ikl) \right] = \epsilon_k c_k \exp(ikl) \quad (3.74)$$

が得られる．ここで ϵ_k は波数 k に対応する励起エネルギー ϵ である．両辺を $c_k \exp(ikl)$ で割ると

$$J \left[\frac{1}{2} \exp(ik) + \frac{1}{2} \exp(-ik) - 1 \right] = \epsilon_k \\ \therefore \epsilon_k = J(\cos k - 1) \quad (3.75)$$

が得られる．

2 マグノン状態

2 マグノンの固有状態を求めることも可能であるが (Bethe 仮説)、ややこしくなるので省く．

簡単に言えば 1 マグノン 2 個を独立に重ね合わせた状態の他、2 マグノンの束縛状態が出現することがある．

高次元他への一般化

強磁性基底状態とそこからの 1 マグノン励起は、高次元でも同様に計算可能である．ただし状態密度が異なる．

また、反強磁性ハミルトニアンであっても、強磁場をかけての飽和磁化近傍の現象を扱うにも適している．

ただしこの方法は、反強磁性の磁場 0 での基底状態や低励起状態を扱うには適していない．

3.3.3 スピン波近似

スピン波の素励起を扱う別の方法として，Holstein-Primakoff 変換を紹介する．これはスピン演算子を，ボソンの生成消滅演算子で表現するものである．

Holstein-Primakoff 変換

一般のスピン S を考える．この時， \hat{S}^z の固有値は

$$m = -S, -S + 1, \dots, S \quad (3.76)$$

で，対応する \hat{S}^z の固有状態を $|m\rangle$ とする．

$$\hat{S}^z |m\rangle = m |m\rangle \quad (3.77)$$

このような固有状態の系 $|m\rangle$ は規格化直交系をなす． \hat{S}^z が最大となる固有状態は $|S\rangle$ である．

上昇下降演算子を含めた関係は

$$\hat{S}^+ |m\rangle = \sqrt{(S-m)(S+m+1)} |m+1\rangle \quad (3.78a)$$

$$\hat{S}^- |m\rangle = \sqrt{(S-m+1)(S+m)} |m-1\rangle \quad (3.78b)$$

$$\hat{S}^{z+} |m\rangle = m |m\rangle \quad (3.78c)$$

である．

ボソンの生成消滅演算子を \hat{a}^\dagger, \hat{a} とし，数演算子を $\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}$ とする． $|S\rangle$ 状態からのズレをボソンの数と解釈しよう．つまり，

$$\hat{n} |m\rangle = \hat{a}^\dagger \hat{a} |m\rangle = (S-m) |m\rangle \quad (3.79)$$

明かに

$$\hat{S}^z = S - \hat{n} \quad (3.80)$$

である．実際 $\hat{S}^z |m\rangle = (S - \hat{n}) |m\rangle = [S - (S - m)] |m\rangle = m |m\rangle$ である．したがって (3.78c) が満たされていることがわかった．

次にスピンの昇降演算子とボソンの演算子の関係は

$$\hat{S}^+ = (2S)^{1/2} \sqrt{1 - \frac{\hat{n}}{2S}} \hat{a} \quad (3.81a)$$

$$\hat{S}^- = \hat{a}^\dagger (2S)^{1/2} \sqrt{1 - \frac{\hat{n}}{2S}} \quad (3.81b)$$

である．

[証明] まず消滅演算子について

$$\hat{a}|m\rangle = A_m|m+1\rangle \quad (3.82)$$

(A_m は係数) である．またこの状態のエルミート共役をとると

$$\langle m|\hat{a}^\dagger = A_m^*\langle m+1| \quad (3.83)$$

となる．これらの内積をとると

$$\langle m|\hat{a}^\dagger\hat{a}|m\rangle = |A_m|^2\langle m+1|m+1\rangle \quad (3.84)$$

規格化条件 $\langle m|m\rangle = \langle m+1|m+1\rangle = 1$ を考慮し， A_m を実数とすると

$$A_m = \sqrt{S-m} \quad (3.85)$$

となる．生成演算子についても

$$\hat{a}^\dagger|m\rangle = B_m|m-1\rangle \quad (3.86)$$

から

$$B_m = \sqrt{S-m} \quad (3.87)$$

が得られる．

(3.81a) を使うと

$$\begin{aligned} \hat{S}^+|m\rangle &= (2S)^{1/2}\sqrt{1-\frac{\hat{n}}{2S}}\hat{a}|m\rangle \\ &= (2S)^{1/2}\sqrt{S-m}\sqrt{1-\frac{\hat{n}}{2S}}|m+1\rangle \\ &= (2S)^{1/2}\sqrt{S-m}\sqrt{1-\frac{S-m-1}{2S}}|m+1\rangle \\ &= \sqrt{S-m}\sqrt{2S-S+m+1}|m+1\rangle \\ &= \sqrt{S-m}\sqrt{S+m+1}|m+1\rangle \end{aligned} \quad (3.88)$$

したがって，(3.78a) が満たされている．同様に (3.81b) から (3.78b) が満たされることが分かる． [証明終]

強磁性体のスピン波近似

Holstein-Primakoff 変換のままでは，ボソン演算子の高次の項が（無限個）現れるため，扱いにくい．そこでまず以下の近似から出発する．

$$\hat{S}_j^+ \approx (2S)^{1/2} \hat{a}_j \quad (3.89a)$$

$$\hat{S}_j^- \approx (2S)^{1/2} \hat{a}_j^\dagger \quad (3.89b)$$

$$\hat{S}_j^z = S - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \quad (3.89c)$$

強磁性体のハミルトニアンを

$$\hat{H} = \frac{J}{2} \sum_j \sum_\rho \hat{\mathbf{S}}_j \cdot \hat{\mathbf{S}}_{j+\rho} \quad (3.90)$$

とする．ここで $J < 0$ で，添字 j は全ての格子で和をとり， ρ は点 j の ν 個の最近接格子について和をとる．昇降演算子を使って書き直すと

$$\hat{\mathbf{S}}_j \hat{\mathbf{S}}_{j+\rho} = \hat{S}_j^z \hat{S}_{j+\rho}^z + \frac{1}{2} (\hat{S}_j^+ \hat{S}_{j+\rho}^- + \hat{S}_j^- \hat{S}_{j+\rho}^+) \quad (3.91)$$

である．

すると，強磁性体のハミルトニアンは，生成消滅演算子の 2 次の項まで近似すると

$$\hat{H} \approx E_{FF} - \frac{JS}{2} \sum_j \sum_\rho (\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_{j+\rho}^\dagger \hat{a}_{j+\rho} - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j+\rho} - \hat{a}_{j+\rho}^\dagger \hat{a}_j) \quad (3.92)$$

ここで $E_{FF} = \frac{JNS^2\nu}{2}$ は強磁性状態の基底エネルギーである．

Fourier 変換した演算子

$$\hat{a}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \exp(ikj) \hat{a}_j \quad (3.93a)$$

$$\hat{a}_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \exp(-ikj) \hat{a}_j^\dagger \quad (3.93b)$$

$$\hat{a}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(-ikj) \hat{a}_k \quad (3.93c)$$

$$\hat{a}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(ikj) \hat{a}_k^\dagger \quad (3.93d)$$

を使うと，自由なボソンの系になる．

$$\begin{aligned}\hat{H} &\approx E_{FF} - \frac{JS}{2} \sum_k \sum_\rho (1 + 1 - \exp(-ik\rho) - \exp(ik\rho)) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \\ &= E_{FF} + \sum_k \epsilon_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k\end{aligned}\quad (3.94)$$

ここで

$$\epsilon_k = -JS \sum_\rho (1 - \cos k\rho) \quad (3.95)$$

である．

反強磁性体のスピン波近似

反強磁性体は古典的には隣接格子でのスピンの互いに反平行になる2つの副格子に分割可能な bipartite lattice (例，2次元での正方格子，蜂の巣格子，3次元での単純立方格子，bcc 格子) を扱う．古典の場合は，A 副格子のスピンは上向き，B 副格子のスピンは下向きとする．

量子力学で扱う場合，Néel 状態 (A 副格子のスピンは $|+S\rangle$ ，B 副格子のスピンは $| - S\rangle$) を考える．強磁性の場合とは異なり，反強磁性体では Néel 状態は固有状態ではなく，したがって基底状態でもない．しかし，Néel 状態を反強磁性体の基底状態にたいする良い近似と考えることができる．

A 副格子では

$$\hat{S}^+ \approx (2S)^{1/2} \hat{a}, \quad \hat{S}^- \approx (2S)^{1/2} \hat{a}^\dagger, \quad \hat{S}^z = S - \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (3.96)$$

(ここで $\langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle = \langle \hat{n} \rangle$ は小さいものとする)

ところで，B 副格子では $| - S\rangle$ 状態からのズレを考えないといけない．B 副格子のボソン演算子を \hat{b} とする．まず

$$\hat{b}^\dagger \hat{b} = S + \hat{S}^z$$

したがって

$$\hat{S}^z = -S + \hat{b}^\dagger \hat{b} \quad (3.97)$$

B 副格子での昇降演算子については

$$\hat{S}^+ \approx (2S)^{1/2} \hat{b}^\dagger \quad (3.98a)$$

$$\hat{S}^- \approx (2S)^{1/2} \hat{b} \quad (3.98b)$$

ハミルトニアンは

$$\hat{H} \approx E_N + \frac{JS}{2} 2 \sum_j \sum_\rho (\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j + \hat{b}_{j+\rho}^\dagger \hat{b}_{j+\rho} + \hat{a}_j^\dagger \hat{b}_{j+\rho}^\dagger + \hat{a}_{j+\rho} \hat{b}_j) \quad (3.99)$$

ここで, $E_N = -\frac{JNS^2\nu}{2}$
Bogoliubov 変換して解く.

3.4 その他の素励起

3.4.1 プラズモン

金属や半導体のプラズマ振動を量子化したもの.

プラズマは, 気体を構成する分子が部分的または完全に電離し, 陽イオンと電子に別れて自由に運動している状態である. 金属中では質量の大きな陽イオンは相互作用で格子を組んでおりその揺らぎがフォノンとして寄与するが, 電子は Fermi エネルギーがクーロン相互作用より大きいので自由電子ガスとみなすことができる. この様な系で電子ガスが揺らぐと, 電荷の中性条件が破れて復元力が働く. この自由電子の集団運動(振動)をプラズマ振動とよぶ.

電子の質量を m_e , 電荷を e , 真空の誘電率を ϵ_0 とする. 金属中の電子密度を n_e とすると, 温度 0 でのプラズマ振動数は

$$\omega_p = \sqrt{\frac{n_e e^2}{m_e \epsilon_0}} \quad (3.100)$$

となる.

プラズマ振動数以下の電磁波は, 金属中では減衰が大きく通過できない.

3.4.2 エキシトン

電子とホールのクーロン力による束縛状態
絶縁体や半導体で見られる.

3.5 素励起の観測

素励起の観測には力学的なもの、電磁気学的なもの、粒子的なものが考えられる。

3.5.1 中性子非弾性散乱

入射粒子と散乱粒子のエネルギーおよび運動量を素励起の量と結びつけ、それから素励起の分散関係を見出す。

簡単のため、単位胞に1個の原子しか含まない結晶を考える。これに運動量 $\hbar p$ の中性子をあて、運動量 $\hbar p'$ の中性子が散乱される過程を考える。中性子の位置座標を r とし、結晶中の点 R_l にある原子と中性子とのポテンシャルを $v(r - R)$ とおくと、相互作用ハミルトニアンは

$$H' = \sum_l v(r - R_l) \quad (3.101)$$

で与えられる。原子の平衡の位置を x_l 、その原子の x_l からの変位を $\xi(x_l, t)$ とすると

$$R_l = x_l + \xi(x_l, t) \quad (3.102)$$

相互作用ハミルトニアンのうち、中性子の散乱に寄与するのは

$$\begin{aligned} & \langle p' | H' | p \rangle \\ & \propto \sum_l \int dr v(r - R_l) \exp(-i(p' - p) \cdot r) \\ & = \sum_l \exp(-i(p' - p) \cdot R_l) \int dr v(r - R_l) \exp(-i(p' - p) \cdot (r - R_l)) \\ & \propto \rho_{p'-p}(t) v_{p'-p} \end{aligned} \quad (3.103)$$

ただし、 v_p は $v(r)$ のフーリエ変換、また

$$\rho_{p'-p}(t) = \frac{1}{V} \sum_l \exp(-i(p' - p) \cdot R_l(t)) \quad (3.104)$$

(V は結晶の体積) である。中性子散乱の確率は $|\langle p' | H' | p \rangle|^2$ に比例する。原子が静止している場合には、

$$R_l = x_l \quad (3.105)$$

であるので、そのときの ρ を $\rho^{(0)}$ とすると、

$$\rho_{\mathbf{p}'-\mathbf{p}}^{(0)}(t) = \frac{1}{V} \sum_l \exp(-i(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{x}_l) = \frac{N}{V} \delta_{\mathbf{p}'-\mathbf{p}, \mathbf{K}} \quad (3.106)$$

ここで、 \mathbf{K} は逆格子ベクトル。この式は、Bragg 反射の条件に他ならない。

次に原子の振動を考慮する。格子の変位をフォノンの量子数で表すと

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}_l, t) &= \sum_{r, \mathbf{k}} (\hat{a}_r(\mathbf{k}) \mathbf{u}(\mathbf{k}, r) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_l - i\omega_{\mathbf{k}} t) \\ &\quad + \hat{a}_r^\dagger(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}, r) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_l + i\omega_{\mathbf{k}} t)) \end{aligned}$$

であったので、

$$\begin{aligned} \rho_{\mathbf{p}'-\mathbf{p}}(t) &= \frac{1}{V} \sum_l \exp[-i(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot (\mathbf{x}_l + \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}_l, t))] \\ &= \frac{1}{V} \sum_l \exp(-i(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{x}_l) \\ &\quad \times \prod_{r, \mathbf{k}} \exp[-i(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot (\hat{a}_r(\mathbf{k}) \mathbf{u}(\mathbf{k}, r) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_l - i\omega_{\mathbf{k}} t) + \hat{a}_r^\dagger(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}, r) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_l + i\omega_{\mathbf{k}} t))] \end{aligned} \quad (3.107)$$

ここで、 $N \gg 1$ したがって $|\mathbf{u}| \ll 1$ となることを考慮して、 $\exp[]$ を展開すると

$$\exp[] = 1 - i(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot (\hat{a}_r(\mathbf{k}) \mathbf{u}(\mathbf{k}, r) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_l - i\omega_{\mathbf{k}} t) + \hat{a}_r^\dagger(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}, r) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_l + i\omega_{\mathbf{k}} t)) + \dots \quad (3.108)$$

となる。高次の項を省略すると

$$\begin{aligned} \prod_{r, \mathbf{k}} \exp[] &= 1 - i(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \sum_{r, \mathbf{k}} (\hat{a}_r(\mathbf{k}) \mathbf{u}(\mathbf{k}, r) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_l - i\omega_{\mathbf{k}} t) \\ &\quad + \hat{a}_r^\dagger(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}, r) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_l + i\omega_{\mathbf{k}} t)) \end{aligned} \quad (3.109)$$

したがって、

$$\rho_{\mathbf{p}'-\mathbf{p}}(t) = \frac{1}{V} \sum_l \exp(-i(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{x}_l) [1 - i(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \sum_{r, \mathbf{k}} (())] \quad (3.110)$$

を得る .

$$\text{フォノン吸収過程} \quad \mathbf{p}' = \mathbf{p} + \mathbf{k} + \mathbf{K}, \epsilon' = \epsilon + \hbar\omega(\mathbf{k}) \quad (3.111)$$

$$\text{フォノン放出過程} \quad \mathbf{p}' = \mathbf{p} - \mathbf{k} + \mathbf{K}, \epsilon' = \epsilon - \hbar\omega(\mathbf{k}) \quad (3.112)$$

ただし、 ϵ は (質量 M_N の) 中性子のエネルギーで、

$$\epsilon = \frac{\hbar^2}{2M_N} \mathbf{p}^2$$

また $\omega(\mathbf{k})$ は波数 \mathbf{k} を持ったフォノンの角振動数である .

この選択則を用いると、散乱前後の中性子のエネルギーとビームの方向をはかれば ω と \mathbf{k} の関係が実験的に求められる .

第4章 ボーズ・アインシュタイン 凝縮とコヒーレント状態

この章ではボーズ粒子系のボーズアインシュタイン凝縮 (Bose-Einstein condensation, BEC) を扱う。現象としては、液体ヘリウム (^4He の超流動相 (1937)、レーザー冷却した中性原子気体 (^{87}Rb , ^{23}Na (1995), ^7Li , ^{41}K), スピン偏極水素原子 (^1H , 磁気トラップ+蒸発冷却 (1998)) や励起子 (エキシトン)(2011) などがある。

4.1 問題設定

まず、1粒子ハミルトニアンとして

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x}) \quad (4.1)$$

をとり、その下での完全正規直交系をなす固有関数系 $\{\varphi_n\}$

$$H\varphi_n = E_n\varphi_n \quad (4.2)$$

が得られているとする。

次の生成消滅演算子の系を考え、

$$[\hat{a}_n, \hat{a}_m^\dagger] = \delta_{m,n}, \quad [\hat{a}_n, \hat{a}_m] = 0 \quad (4.3)$$

第2量子化したハイゼンベルク表示のボーズ粒子場を次のように定義する。

$$\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) \equiv \sum_n \hat{a}_n \varphi_n(\mathbf{x}) \exp(-iE_n t/\hbar) \quad (4.4)$$

この場は、次の交換関係を満たす。

$$[\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t), \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}', t)] = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad [\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t), \hat{\varphi}(\mathbf{x}', t)] = 0 \quad (4.5)$$

第2量子化されたハミルトニアンは、

$$\hat{H} = \int d^3x \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t) H \hat{\phi}(\mathbf{x}, t) = \sum_n E_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n \quad (4.6)$$

であり、総粒子数は

$$\hat{Q} = \int d^3x \hat{\rho}(\mathbf{x}, t) = \sum_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n, \quad \hat{\rho}(\mathbf{x}, t) \equiv \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\phi}(\mathbf{x}, t) \quad (4.7)$$

と表される．また粒子流密度は次の式で与えられる．

$$\hat{\mathbf{J}} \equiv \frac{\hbar}{2mi} [\hat{\phi}^\dagger \nabla \hat{\phi} - (\nabla \hat{\phi}^\dagger) \hat{\phi}] \quad (4.8)$$

(Noether current)

演算子に関して、次の連続の方程式が成立する．

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} + \nabla \cdot \hat{\mathbf{J}} = 0 \quad (4.9)$$

4.2 自発的対称性の破れ

ボーズアインシュタイン凝縮にともない、位相の「自発的対称性の破れ」がおきる。

4.2.1 粒子数確定の基底状態

粒子数の確定した基底状態 $|\Phi_0\rangle$, $\hat{Q}|\Phi_0\rangle = Q_0|\Phi_0\rangle$ (粒子数 Q_0 は整数) を考える．この時、位相のユニタリー演算子 $\exp(i\alpha\hat{Q})$ (α : 実数) を考えると、 \hat{Q} の固有値は整数なので、 $\alpha \rightarrow \alpha + 2\pi$ としても不変で $U(1)$ 対称である．このユニタリー演算子で $|\Phi_0\rangle$ を変換すると、

$$\exp(i\alpha\hat{Q})|\Phi_0\rangle = e^{i\alpha Q_0}|\Phi_0\rangle \propto |\Phi_0\rangle \quad (4.10)$$

で、 $|\Phi_0\rangle$ は $U(1)$ 対称な非縮退状態である．

ボーズ粒子場に対する位相のユニタリー変換は、次のように表される:

$$\exp(i\alpha\hat{Q})\hat{\phi}(\mathbf{x})\exp(-i\alpha\hat{Q}) = e^{-i\alpha}\hat{\phi}(\mathbf{x}) \quad (4.11)$$

この性質と、 $|\Phi_0\rangle$ が非縮退状態であることから、次の2つの式が同時に成立する。

$$\begin{aligned}\langle\Phi_0|\exp(i\alpha\hat{Q})\hat{\varphi}(\mathbf{x})\exp(-i\alpha\hat{Q})|\Phi_0\rangle &= e^{i\alpha Q_0}e^{-i\alpha Q_0}\langle\Phi_0|\hat{\varphi}(\mathbf{x})|\Phi_0\rangle \\ &= \langle\Phi_0|\hat{\varphi}(\mathbf{x})|\Phi_0\rangle\end{aligned}\quad (4.12)$$

$$\langle\Phi_0|\exp(i\alpha\hat{Q})\hat{\varphi}(\mathbf{x})\exp(-i\alpha\hat{Q})|\Phi_0\rangle = e^{-i\alpha}\langle\Phi_0|\hat{\varphi}(\mathbf{x})|\Phi_0\rangle\quad (4.13)$$

これらが両立するためには

$$\langle\Phi_0|\hat{\varphi}(\mathbf{x})|\Phi_0\rangle = 0\quad (4.14)$$

でなければならない。

4.2.2 コヒーレント状態 (粒子数不確定)

次に別の状態を考えるため、まず外場や粒子間相互作用がないとする。基底状態の規格化された波動関数を $\varphi_0(x) = 1/\sqrt{V}$ (V は系の体積) とし、基底状態エネルギー $E_0 = 0$ とする。

ここで、次のコヒーレント状態を導入する

$$\begin{aligned}|\phi\rangle &= \exp(\sqrt{V}(\phi\hat{a}_0^\dagger - \phi^*\hat{a}_0))|0\rangle \\ &= \exp(-\frac{1}{2}V|\phi|^2)\sum_{N_0=0}^{\infty}(\sqrt{V}\phi)^{N_0}\frac{1}{\sqrt{N_0!}}|N_0\rangle\end{aligned}\quad (4.15)$$

(ϕ : 複素数). コヒーレント状態はエネルギーが 0 の固有状態の和なので、総和としてもエネルギーは 0 である。又粒子数は不確定である。

ところで、(コヒーレント状態の性質より)

$$\begin{aligned}\hat{a}_0|\phi\rangle &= \sqrt{V}\phi|\phi\rangle, \\ \hat{a}_n|\phi\rangle &= 0\end{aligned}\quad (n \neq 0)\quad (4.16)$$

したがって

$$\hat{\varphi}(\mathbf{x})|\phi\rangle = \sum_n \hat{a}_n \varphi_n(\mathbf{x}) \exp(-iE_n t/\hbar)|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}\sqrt{V}\phi|\phi\rangle = \phi|\phi\rangle\quad (4.17)$$

つまり $\hat{\varphi}(x)$ の (コヒーレント状態による) 期待値は

$$\langle\phi|\hat{\varphi}(\mathbf{x})|\phi\rangle = \phi \neq 0\quad (4.18)$$

である。

この状態に位相のユニタリー変換を施すと

$$\exp(-i\alpha\hat{Q})|\phi\rangle = |e^{-i\alpha}\phi\rangle \quad (4.19)$$

となる (証明

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}(\mathbf{x})(\exp(-i\alpha\hat{Q})|\phi\rangle) &= \exp(-i\alpha\hat{Q})\exp(i\alpha\hat{Q})\hat{\varphi}(\mathbf{x})\exp(-i\alpha\hat{Q})|\phi\rangle \\ &= \exp(-i\alpha\hat{Q})e^{-i\alpha}\hat{\varphi}(\mathbf{x})|\phi\rangle \\ &= e^{-i\alpha}\phi(\exp(-i\alpha\hat{Q})|\phi\rangle) \end{aligned} \quad (4.20)$$

終わり)。これは元の状態 $|\phi\rangle$ とは異なる。実際、

$$|\langle\phi'|\phi\rangle|^2 = \exp(-V|\phi - \phi'|^2) \quad (4.21)$$

なので、体積無限大の極限では

$$\lim_{V \rightarrow \infty} |\langle\phi'|\phi\rangle|^2 = 0 \quad (4.22)$$

となる。これは、独立なゼロエネルギーの状態が無数に存在することを意味している。

状態 $|\phi\rangle$ の粒子数密度は

$$\langle\phi|\hat{\rho}(\mathbf{x})|\phi\rangle = |\phi|^2 \quad (4.23)$$

である。したがって、

$$\phi = \sqrt{\rho}\exp(i\theta) \quad (4.24)$$

とおくことができる。

注意

コヒーレント状態は、(個数状態の)真空をユニタリー変換して得られた (4.15)。また、位相変換もユニタリー変換であった。有限自由度では、ユニタリー変換で結ばれたヒルベルト空間はどれを採用しても物理的には等価である。

しかし体積無限 ($V \rightarrow \infty$) ではこれは自明ではない。(4.22) はこのことと関連している。ユニタリー非同値 (unitary inequivalent), Haag の定理

4.2.3 非対角長距離秩序

相互作用のない系でコヒーレント状態では、相関関数は

$$R(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \langle \phi | \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\phi}(\mathbf{x}') | \phi \rangle = \langle \phi | \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) | \phi \rangle \langle \phi | \hat{\phi}(\mathbf{x}') | \phi \rangle \quad (4.25)$$

となる。これを相互作用のある場合に拡張すると、

$$\begin{aligned} R(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \langle \phi | \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\phi}(\mathbf{x}') | \phi \rangle \\ &= \langle \phi | \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) | \phi \rangle \langle \phi | \hat{\phi}(\mathbf{x}') | \phi \rangle + f(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \end{aligned} \quad (4.26)$$

となる。後で示すように第2項は無限度で0になる短距離相関である。第1項で表される長距離相関が有限に残るとき、非対角長距離秩序 (off-diagonal long range order: ODLRO) が存在するといいい、Bose 凝縮が起きていると定義する。複素数

$$\phi \equiv \langle \phi | \hat{\phi}(\mathbf{x}) | \phi \rangle \quad (4.27)$$

は、Bose 凝縮が起こる場合に有限の値を持つ秩序変数である。

次の相関関数を考えよう。

$$\begin{aligned} R(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \langle \chi | \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\phi}(\mathbf{x}') | \chi \rangle \\ &= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}') \langle \chi | \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'} | \chi \rangle \end{aligned} \quad (4.28)$$

これは一様な系では $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$ のみによるので、系全体の平均をとると、

$$\begin{aligned} R(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \frac{1}{V} \int d^3 y \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \exp(-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} + \mathbf{y}) + i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{x}' + \mathbf{y})) \langle \chi | \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'} | \chi \rangle \\ &= \frac{1}{V} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}') \langle \chi | \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'} | \chi \rangle \\ &= \frac{1}{V} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \exp(-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')) \langle \chi | \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} | \chi \rangle \\ &= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \exp(-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')) \rho_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (4.29)$$

($\rho_{\mathbf{k}}$ は運動量 \mathbf{k} を持つ粒子の、単位体積当たりの密度) ここで、

$$\rho_{\mathbf{k}} = \rho_0 (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{k}) + \tilde{f}(\mathbf{k}) \quad (4.30)$$

とおいてみる ($\tilde{f}(k)$ はなめらかな関数で L^1 積分可能)。すると、

$$R(x - x') = \rho_0 + f(x - x') \quad (4.31)$$

となる。ここで f は \tilde{f} の Fourier 変換である。Riemann-Lebesgue の補題 (lemma) によると $|x - x'| \rightarrow \infty$ の極限では、 $f \rightarrow 0$ となる。したがって $|x - x'| \rightarrow \infty$ でも $R(x - x')$ が有限に残るならば、 $\rho_0 \neq 0$ で、Bose 凝縮が起こっていることを意味する。

4.2.4 相互作用とコヒーレント状態

相互作用が無い場合には、粒子数演算子の固有状態とコヒーレント状態はエネルギーは同じで、どちらも基底状態である。

4.3 希薄な Bose 気体

この節では相互作用を考慮する。希薄な Bose 気体では、相互作用が十分小さいものとして扱うことができる。

4.3.1 Bogoliubov(ボゴリューボフ)変換

まず体積 V が有限な系で、周期的境界条件をとり離散的な運動量を持つものとして定式化する。第2量子化されたハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{\lambda}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \hat{a}_{\mathbf{k}_4}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_3}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1},$$

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}, \quad \lambda > 0 \quad (4.32)$$

となる。ここで相互作用項は、実空間でデルタ関数的な斥力による項 $\frac{\lambda}{2}(\hat{\varphi}^\dagger \hat{\varphi})^2$ を運動量空間で表示したものである。

N 個の粒子のうち、有限な割合にあたる巨視的な N_0 個の粒子が $\mathbf{k} = 0$ の状態を占めているものとする。相互作用のない系の基底状態として、次のようなコヒーレント状態をとる。

$$|\phi_0\rangle = \exp(\sqrt{N_0}(e^{i\theta} \hat{a}_0^\dagger - e^{-i\theta} \hat{a}_0))|0\rangle \quad (4.33)$$

(θ : 実数. また (4.15) 式で $|\phi_0\rangle = \sqrt{\rho_0} = \sqrt{N_0/V}$ とした).

相互作用が加わっても、大部分は $k = 0$ の状態にとどまり、 $k \neq 0$ の粒子は少数とする (これは後の (4.49) で示すように希薄で相互作用が小さい場合 $\rho\lambda^3 \ll (\hbar^2/m)^3$ にあたる). 相互作用の $\hat{a}_{k_4}^\dagger \hat{a}_{k_3}^\dagger \hat{a}_{k_2} \hat{a}_{k_1}$ の項は

- 4つとも $k = 0$ か (大部分)、
- 3つが $k = 0$ の項は (運動量保存則から) 許されず、
- 2つだけ $k = 0$ か (少数)、

それ以外は無視できるとする. すると、

$$\hat{H}_{int} \approx \frac{\lambda}{2V} \left[\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 + \sum_{k \neq 0} \left\{ 4\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_0 + \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_{-k} \right\} \right] \quad (4.34)$$

ここでコヒーレント状態 $|\phi_0\rangle$ による期待値をとると

$$\hat{a}_0 |\phi_0\rangle = \sqrt{N_0} e^{i\theta} |\phi_0\rangle, \quad \langle \phi_0 | \hat{a}_0^\dagger = \sqrt{N_0} e^{-i\theta} \langle \phi_0 |$$

を用いることで式が単純化できる. しかしこのままでは

$$\hat{a}_k |\phi_0\rangle = 0, \quad (k \neq 0)$$

で都合が悪い (基底状態エネルギーの変分ができず, よりエネルギーの低い状態が探せない). そこで、あるユニタリー変換 \hat{U} をとって、

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &\equiv \hat{U} |\phi_0\rangle, \\ \hat{a}_0 |\phi\rangle &= \sqrt{N_0} e^{i\theta} |\phi\rangle, \quad \hat{a}_k |\phi\rangle \neq 0, \quad (k \neq 0) \end{aligned} \quad (4.35)$$

となるようにできるものとする. 今後 $|\phi\rangle$ を相互作用のある場合の基底状態と考える. ユニタリー変換 \hat{U} は後で求める.

すると、

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle &\approx \langle \phi | \sum_{k \neq 0} \epsilon(\mathbf{k}) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k | \phi \rangle \\ &+ \frac{\lambda}{2V} \langle \phi | \left[N_0^2 + 4N_0 \sum_{k \neq 0} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + N_0 \sum_{k \neq 0} (e^{i2\theta} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{-k}^\dagger + e^{-i2\theta} \hat{a}_k \hat{a}_{-k}) \right] | \phi \rangle \end{aligned} \quad (4.36)$$

ところで、全粒子数の期待値は

$$N = \langle \phi | \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \hat{a}_\mathbf{k}^\dagger \hat{a}_\mathbf{k} | \phi \rangle = N_0 + \langle \phi | \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \hat{a}_\mathbf{k}^\dagger \hat{a}_\mathbf{k} | \phi \rangle \quad (4.37)$$

であり、 $\langle \phi | \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \hat{a}_\mathbf{k}^\dagger \hat{a}_\mathbf{k} | \phi \rangle$ は N_0 と比較して十分小さい(後で確認する)。
(4.37) を (4.36) に代入して、 $\langle \phi | \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \hat{a}_\mathbf{k}^\dagger \hat{a}_\mathbf{k} | \phi \rangle$ の1次の項まで残せば、

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle &\approx \frac{1}{2} V \lambda \rho^2 + \langle \phi | \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda \rho) \hat{a}_\mathbf{k}^\dagger \hat{a}_\mathbf{k} | \phi \rangle \\ &\quad + \frac{1}{2} \lambda \rho \langle \phi | \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (e^{i2\theta} \hat{a}_\mathbf{k}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger + e^{-i2\theta} \hat{a}_\mathbf{k} \hat{a}_{-\mathbf{k}}) | \phi \rangle \end{aligned} \quad (4.38)$$

ただし、 $\rho = N/V$ は粒子密度である。

ところで、ボゴリューボフ変換のユニタリー演算子

$$\hat{U}_B \equiv \exp \left(\sum_{\mathbf{k} \neq 0} \eta(\mathbf{k}) (e^{-i2\theta} \hat{a}_\mathbf{k} \hat{a}_{-\mathbf{k}} - e^{i2\theta} \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_\mathbf{k}^\dagger) \right) \quad (4.39)$$

($\eta(\mathbf{k}), \theta$: 実数) をとると、

$$\begin{aligned} \hat{U}_B^\dagger \hat{a}_\mathbf{k} \hat{U}_B &= \hat{a}_\mathbf{k} \cosh \eta(\mathbf{k}) - \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger e^{i2\theta} \sinh \eta(\mathbf{k}) \\ \hat{U}_B^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{U}_B &= \hat{a}_{-\mathbf{k}} \cosh \eta(\mathbf{k}) - \hat{a}_\mathbf{k}^\dagger e^{i2\theta} \sinh \eta(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (4.40)$$

となる。なお、

$$\eta(-\mathbf{k}) = \eta(\mathbf{k})$$

である(フェルミオンでは異なる)。

そこで $|\phi'\rangle \equiv \hat{U}_B^\dagger |\phi\rangle$ とおくと、

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle &= \langle \phi' | \hat{U}_B^\dagger \hat{H} \hat{U}_B | \phi' \rangle \\ &\approx \frac{\lambda \rho^2 V}{2} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \{ (\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda \rho) (\cosh 2\eta(\mathbf{k}) - 1) - \lambda \rho \sinh 2\eta(\mathbf{k}) \} \\ &\quad + \langle \phi' | \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \hat{a}_\mathbf{k}^\dagger \hat{a}_\mathbf{k} \{ (\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda \rho) \cosh 2\eta(\mathbf{k}) - \lambda \rho \sinh 2\eta(\mathbf{k}) \} \\ &\quad + \frac{1}{2} (e^{i2\theta} \hat{a}_\mathbf{k}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger + e^{-i2\theta} \hat{a}_\mathbf{k} \hat{a}_{-\mathbf{k}}) \{ -(\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda \rho) \sinh 2\eta(\mathbf{k}) + \lambda \rho \cosh 2\eta(\mathbf{k}) \} | \phi' \rangle \end{aligned} \quad (4.41)$$

ここで上式のパラメーター $\eta(\mathbf{k})$ にたいして c -数項が極小となる条件

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \eta(\mathbf{k})} \{(\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda\rho) \cosh 2\eta(\mathbf{k}) - \lambda\rho \sinh 2\eta(\mathbf{k})\} \\ & = 2 \{(\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda\rho) \sinh 2\eta(\mathbf{k}) - \lambda\rho \cosh 2\eta(\mathbf{k})\} = 0 \end{aligned} \quad (4.42)$$

をとる ($\mathbf{k} \neq 0$ のモードにたいする変分にあたる)。またこれは $\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger$ や $\hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}}$ の係数が 0 という条件とも一致する。

すると、

$$\tanh 2\eta(\mathbf{k}) = \frac{\lambda\rho}{\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda\rho}, \quad (\mathbf{k} \neq 0) \quad (4.43)$$

または、

$$\begin{aligned} \cosh 2\eta(\mathbf{k}) &= \frac{\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda\rho}{\sqrt{(\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda\rho)^2 - (\lambda\rho)^2}}, \\ \sinh 2\eta(\mathbf{k}) &= \frac{\lambda\rho}{\sqrt{(\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda\rho)^2 - (\lambda\rho)^2}} \end{aligned} \quad (4.44)$$

が得られる。

結局ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \hat{U}_B^\dagger \hat{H} \hat{U}_B = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} E(\mathbf{k}) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + E_g, \\ E(\mathbf{k}) &= \sqrt{(\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda\rho)^2 - (\lambda\rho)^2}, \end{aligned} \quad (4.45)$$

となる。基底状態エネルギーは

$$\begin{aligned} \frac{E_g}{V} &= \frac{\lambda\rho^2}{2} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (\sqrt{(\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda\rho)^2 - (\lambda\rho)^2} - (\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda\rho)) \\ &= \frac{\lambda\rho^2}{2} + \frac{1}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} (\sqrt{(\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda\rho)^2 - (\lambda\rho)^2} - (\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda\rho)) \end{aligned} \quad (4.46)$$

となり、全体としてエネルギーは負の値をとる。

$|\mathbf{k}| \ll 1$ ならば、分散関係は

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{\epsilon(\mathbf{k})(\epsilon(\mathbf{k}) + 2\lambda\rho)} \approx \hbar|\mathbf{k}| \sqrt{\frac{\lambda\rho}{m}} \quad (4.47)$$

となる。この様な線形の分散関係は、流体中の”音波”の特徴であり、フォノンの素励起とみなせる。一方、 $|\mathbf{k}|$ が大きくなると、通常自由粒子の分散関係 $E(\mathbf{k}) \approx \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$ に移行する。

ところで、ボゴリューボフ変換により、状態 $|\phi\rangle$ は $|\phi'\rangle = \hat{U}_B^\dagger |\phi\rangle$ に変換されたが、これが演算子 \hat{a}_k の真空になるような場合を探そう、つまり、

$$\hat{a}_k |\phi'\rangle = 0$$

このためには、最初のユニタリー変換 (4.35) を

$$\hat{U} = \hat{U}_B$$

ととればよい。また、これは (この近似の枠内で) 基底エネルギーが最低となる基底状態でもある。

波数 $k \neq 0$ の粒子密度の割合を計算しよう。まず、

$$\begin{aligned} N &= \langle \phi | \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 + \sum_{k \neq 0} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k | \phi \rangle \\ &= N_0 + \langle \phi | \sum_{k \neq 0} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k | \phi \rangle \\ &= N_0 + \sum_{k \neq 0} \langle \phi' | \hat{U}_B^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \hat{U}_B | \phi' \rangle \\ &= N_0 + \sum_{k \neq 0} \langle \phi' | (\hat{a}_k^\dagger \cosh \eta(\mathbf{k}) - \hat{a}_{-\mathbf{k}} e^{-i2\theta} \sinh \eta(\mathbf{k})) (\hat{a}_k \cosh \eta(\mathbf{k}) - \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger e^{i2\theta} \sinh \eta(\mathbf{k})) | \phi' \rangle \\ &= N_0 + \sum_{k \neq 0} \sinh^2 \eta(\mathbf{k}) \langle \phi' | \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger | \phi' \rangle \\ &= N_0 + \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} (\cosh 2\eta(\mathbf{k}) - 1) \end{aligned} \quad (4.48)$$

したがって

$$\begin{aligned}
\frac{\rho - \rho_0}{\rho} &= \frac{1}{2\rho V} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left\{ \frac{\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda\rho}{\sqrt{(\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda\rho)^2 - (\lambda\rho)^2}} - 1 \right\} \\
&= \frac{1}{2\rho} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda\rho}{\sqrt{(\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda\rho)^2 - (\lambda\rho)^2}} - 1 \right\} \\
&= \frac{1}{2\rho(2\pi)^3} 4\pi \int_0^\infty k^2 dk \left\{ \frac{\hbar^2 k^2 / (2m\lambda\rho) + 1}{\sqrt{(\hbar^2 k^2 / 2m\lambda\rho)^2 + 2(\hbar^2 k^2 / 2m\lambda\rho)}} - 1 \right\} \\
&= \frac{m\lambda}{2\pi^2 \hbar^2} \left(\frac{2m\lambda\rho}{\hbar^2} \right)^{1/2} \int_0^\infty y^2 dy \left[\frac{y^2 + 1}{\sqrt{y^4 + 2y^2}} - 1 \right] \\
&= \frac{m\lambda}{2\pi^2 \hbar^2} \left(\frac{2m\lambda\rho}{\hbar^2} \right)^{1/2} \sqrt{2} \int_0^\infty du \left[\frac{u + 1/2}{\sqrt{u + 1}} - u^{1/2} \right] \\
&= \frac{m\lambda}{2\pi^2 \hbar^2} \left(\frac{2m\lambda\rho}{\hbar^2} \right)^{1/2} \sqrt{2} \left[(u + 1)^{1/2} \frac{1}{3} (2u - 1) - \frac{2}{3} u^{3/2} \right]_0^\infty \\
&= \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{m^3 \lambda^3 \rho}{\hbar^6} \right)^{1/2} \tag{4.49}
\end{aligned}$$

となり, $k \neq 0$ の粒子密度の割合が十分小さい条件は, 相互作用が小さく密度が低いこと ($\rho\lambda^3 \ll (\hbar^2/m)^3$) である,

注意

- (弱い) 斥力相互作用のある場合, 粒子数確定状態での変分基底状態エネルギーよりも位相の揃ったコヒーレント状態+ボゴリューボフ変換の方がエネルギーが低い.
- 式 (4.46) は実は発散している. これは相互作用が実空間で δ 関数としたことによる. 有限の大きさの斥力相互作用の場合, 高い運動量成分の寄与が減少するので発散しない.
- 引力相互作用の Bose 粒子系は不安定である.
- Bogoliubov 変換は有限自由度の場合にはユニタリー変換であり, 式 (4.39) も形式的にはユニタリー変換である. しかし体積無限極限 ($V \rightarrow \infty$) の Bogoliubov 変換ではこれになりたない. ユニタリー非同値 (unitary inequivalent)

4.3.2 超流動の Landau 臨界条件

フォノンの分散曲線と超流動条件は以下のように関連付けられる。

質量 M の巨視的な物体が速度 V で流体中を移動する状況を考える。

フォノンの生成にともない、巨視的な物体がエネルギー δE と運動量 $\hbar\delta\mathbf{k}$ を失うとすると、

$$\frac{1}{2M}(M\mathbf{V} + \hbar\delta\mathbf{k})^2 - \frac{1}{2M}(M\mathbf{V})^2 = \hbar\delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{V} + \frac{1}{2M}(\hbar\delta\mathbf{k})^2$$

なので

$$\delta E = \hbar\delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{V} + O\left(\frac{1}{M}\right) \quad (4.50)$$

である。

物体が失うエネルギーと運動量は、フォノンが受け取るエネルギーと運動量に等しいので

$$\delta E = -\hbar \sum \omega(\mathbf{k}_i), \quad \delta\mathbf{k} = -\sum \mathbf{k}_i \quad (4.51)$$

となる。

次にフォノンの位相速度の下限が0でないと仮定する。

$$v_0 = \inf\left(\frac{\omega(\mathbf{k})}{|\mathbf{k}|}\right) \quad (4.52)$$

この最小位相速度から

$$|\delta E| = \hbar \sum \omega(\mathbf{k}_i) \geq \hbar v_0 \sum |\mathbf{k}_i| \geq \hbar v_0 \left| \sum \mathbf{k}_i \right| = \hbar v_0 |\delta\mathbf{k}| \quad (4.53)$$

したがって

$$|\delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{V}| \geq v_0 |\delta\mathbf{k}| \quad (4.54)$$

が成り立つ。

この様な $\delta\mathbf{k}$ は $|\mathbf{V}| \geq v_0$ の時のみに許される。物体はこの最小速度を超えない限り、抵抗力を受けることが無い。

4.4 渦糸

次のコヒーレント状態を考える。

$$|\phi(\mathbf{x})\rangle = \exp(\sqrt{V}(\phi(\mathbf{x})\hat{a}_0^\dagger - \phi^*(\mathbf{x})\hat{a}_0))|0\rangle \quad (4.55)$$

ただし、 $\phi(\mathbf{x})$ は場所の緩やかな関数とする。

すると、

$$\langle \phi(\mathbf{x}) | \hat{\phi} | \phi(\mathbf{x}) \rangle = \phi(\mathbf{x}) = |\phi(\mathbf{x})| \exp(i\theta(\mathbf{x})) \quad (4.56)$$

であり、

$$\langle \phi(\mathbf{x}) | \hat{\phi}^\dagger \hat{\phi} | \phi(\mathbf{x}) \rangle = |\phi(\mathbf{x})|^2 = \rho_0(\mathbf{x}) \quad (4.57)$$

なので

$$\phi(\mathbf{x}) = \sqrt{\rho_0(\mathbf{x})} \exp(i\theta(\mathbf{x})) \quad (4.58)$$

と表される。なお厳密には、 $\rho_0(\mathbf{x})$ は場所の関数であるので、運動量 0 の粒子数密度とは言えないので、今後、

$$\phi(\mathbf{x}) = \sqrt{\rho_s(\mathbf{x})} \exp(i\theta(\mathbf{x})) \quad (4.59)$$

のように表すことにする。

すると 粒子流密度演算子 (4.8)

$$\hat{\mathbf{J}} = \frac{\hbar}{2mi} (\hat{\phi}^\dagger \nabla \hat{\phi} - (\nabla \hat{\phi}^\dagger) \hat{\phi})$$

のコヒーレント状態による期待値は

$$\begin{aligned} & \langle \phi(\mathbf{x}) | \hat{\mathbf{J}} | \phi(\mathbf{x}) \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \langle \phi(\mathbf{x}) | (\hat{\phi}^\dagger \nabla \hat{\phi} - (\nabla \hat{\phi}^\dagger) \hat{\phi}) | \phi(\mathbf{x}) \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2mi} [\sqrt{\rho_s} \exp(-i\theta) \nabla (\sqrt{\rho_s} \exp(i\theta)) - \nabla (\sqrt{\rho_s} \exp(-i\theta)) \sqrt{\rho_s} \exp(i\theta)] \\ &= \frac{\hbar}{2mi} 2\rho_s i \nabla \theta \\ &= \frac{\hbar}{m} \rho_s \nabla \theta \end{aligned} \quad (4.60)$$

$\langle \hat{\mathbf{J}} \rangle \equiv \rho_s \mathbf{v}_s$ と定義すると、

$$\mathbf{v}_s = \frac{\hbar}{m} \nabla \theta \quad (4.61)$$

このような流れはポテンシャル流と呼ばれる。ポテンシャル流の性質として

$$\nabla \times \mathbf{v}_s = 0 \quad (4.62)$$

これは (流体力学での) 渦なしの流れに当たる。

4.4.1 特異点としての渦糸

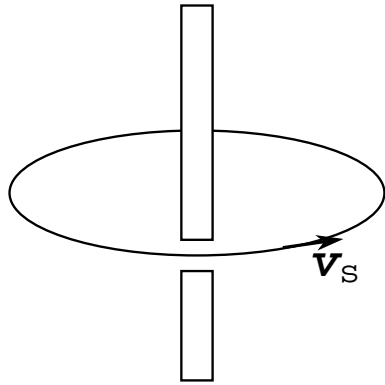
循環 (circulation)

一般に、速度場が $v(r)$ で与えられる流体中で、ある閉曲線 C に沿った線積分

$$\kappa \equiv \oint_C v \cdot dr \quad (4.63)$$

を循環という。

超流動速度場は、ポテンシャル流であるから、流体中の単連結領域¹での循環は0である。



しかし、超流体が存在しない領域²を囲む多重連結の循環では事情が異なる。この場合秩序変数 $\phi(x)$ は一価関数であるので、閉曲線 C を一周した時の位相差 $\Delta\theta$ が $2\pi n$ (n は整数) に限定されることを考慮すると

$$\begin{aligned} \kappa &= \oint_C v_s \cdot dr \\ &= \oint_C \frac{\hbar}{m} \nabla\theta \cdot dr \\ &= \frac{\hbar}{m} 2\pi n \end{aligned} \quad (4.64)$$

となる。したがって循環は以下のように量子化される。

$$\kappa = n\kappa_0, \quad \kappa_0 = \frac{2\pi\hbar}{m} \quad (4.65)$$

¹閉曲線 C を連続的に変形して1点にすることができる領域

²例えばトーラス容器中の流れ、流体中を貫く針金、渦糸がある場合等

特に、直線状の渦を考え、渦を z 軸とした円柱座標 (r, θ, z) を用いると、渦のまわりの超流動速度場は循環 κ の定義とポテンシャル流ということから

$$v_s(\mathbf{r}) = \left(0, \frac{\kappa}{2\pi r}, 0\right) \quad (4.66)$$

となる。

4.4.2 渦糸の生成条件

渦糸のエネルギー

半径 R の円筒容器に超流体がはいっていて、その中心軸上に一本の量子渦があるとしよう。渦に伴うエネルギーは、渦によって誘起される超流動流れの運動エネルギーとして与えられる。単位長さ当たりのエネルギーは

$$\epsilon = \int_a^R \frac{1}{2} \rho_s (v_s)^2 2\pi r dr = \frac{\rho_s \kappa^2}{4\pi} \ln \frac{R}{a} \quad (4.67)$$

となる。ここで渦芯半径 a は発散を回避するカットオフである。

単位長さ当たりのエネルギー ϵ は κ^2 に比例するので、 $n = 2$ の渦糸 1 本は $n = 1$ の渦糸 2 本よりエネルギーが高く、 $n = 1$ の渦糸 2 本の方が安定である。

角運動量の z 軸成分

1 本の量子渦に伴う、超流動流れの角運動量は、単位長さあたり

$$L = \int_a^R \rho_s v_s r \cdot 2\pi r dr = \frac{\rho_s \kappa}{2} (R^2 - a^2) \approx \frac{1}{2} \rho_s \kappa R^2 \quad (4.68)$$

となる。

回転系の平衡条件

角速度 Ω で回転している系での自由エネルギーは

$$F' = F - \Omega L \quad (4.69)$$

である。ここで L は角運動量である。平衡状態は F' が最小の時に実現する。

十分低温ではエントロピー項が無視できるので、

$$E' = E - \Omega L \quad (4.70)$$

が最小となる条件を調べれば良い。

臨界角速度

直線状の1本の渦糸が回転して中心軸に位置する場合、角運動量 L が最大になる。渦糸がない状態では $E' = 0$ であり、渦糸が1本での $E' = 0$ と比較すると、臨界角速度は

$$\Omega_c = \frac{\epsilon}{L} = \frac{\kappa}{2\pi R^2} \ln \frac{R}{a} \quad (4.71)$$

となり、 $\Omega > \Omega_c$ では渦糸のある状態がエネルギー的に低くなる。

不確定性関係

$$R\Omega_c = v_c = \frac{\hbar}{mR} \ln \frac{R}{a} \quad (4.72)$$

(Feynman の臨界速度)。この関係を変形すると、

$$mv_c R = \hbar \ln \frac{R}{a} \quad (4.73)$$

4.4.3 多数の渦糸

回転速度が臨界角速度よりも十分速い場合 ($\Omega \gg \Omega_c$)、多数の渦糸が生じる。

多数の渦糸が一様に分布するものとする。またそれらは

半径 r の円周上の流速 $r\Omega$

循環 $r\Omega \times 2\pi r = 2\pi r^2\Omega$

面積 πr^2 で割ると、単位面積当たりの循環は

$$\frac{2\pi r^2\Omega}{\pi r^2} = 2\Omega \quad (4.74)$$

これは、量子化渦による循環と等しいはずで、ところで量子化渦による循環は $\nu\kappa_0$ (ν 単位面積当たりの渦糸の本数) である。

したがって

$$\nu = \frac{2\Omega}{\kappa_0} = \frac{m\Omega}{\pi\hbar} \quad (4.75)$$

4.5 Ginzburg-Landau 方程式

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \mu \right) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{\lambda}{2V} \sum \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}$$

を実空間で表すと、

$$F - F_n = \int d\mathbf{r} \left[a|\Psi|^2 + \frac{1}{2}b|\Psi|^4 + \frac{\hbar^2}{2m}|\nabla\Psi|^2 \right] \quad (4.76)$$

これは Ginzburg-Landau の自由エネルギーと呼ばれる。

- Ψ が一様な場合 ($\nabla\Psi = 0$)

- $a > 0$ ならば $\Psi = 0$

- $a < 0$ ならば

$$\Psi_0 = \left(\frac{|a|}{b} \right)^{1/2} = (\rho_s)^{1/2} \quad (4.77)$$

- 一様解からの揺らぎ

自由エネルギーの変分 $\delta F = 0$ から

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi = a\Psi + b|\Psi|^2 \Psi \quad (4.78)$$

が得られる。これを Gross-Pitaevskii の方程式と呼ぶ。

- コヒーレンス長

$$\Psi = \Psi_0 + \Psi_1 \quad (4.79)$$

ここで一様な成分は $\Psi_0 = \sqrt{(|a|/b)}$ で、ゆらぎ Ψ_1 は小さいものとする。

これを GL 方程式に代入して $O(\Psi_1)$ まで考慮すると

$$\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} = 2\frac{\Psi_1}{\xi^2}, \quad \xi = \left(\frac{\hbar^2}{2m|a|}\right)^{1/2} \quad (4.80)$$

と言う式が得られる。

この式の解は

$$\Psi_1 \propto \exp(\pm\sqrt{2}x/\xi) \quad (4.81)$$

である。

ξ はコヒーレンス長と呼ばれる。

第5章 超伝導

この章では、超伝導をまず現象的に扱い、電荷を持つ Bose 気体の性質を Ginzburg-Landau 方程式を通して現象論的に調べる。

次に、ミクロな観点から超伝導を扱う。電子はフェルミオンであるので Bose 凝縮を起こさない。しかし、2個の電子を対にした場合、ある2電子状態にマクロの数の電子対が落ち込む可能性がある。これを電子対凝縮という。典型的にはフォノンと電子の相互作用による引力で電子対凝縮 (BCS) が起きる。

フェルミ縮退した系で、相互作用でフェルミオンが対になって超流動となるのは、 ^3He (p 波) の超流動や中性子星内部でもみられる現象である。

5.1 Ginzburg-Landau 理論

5.1.1 Ginzburg-Landau 方程式

電子対が凝縮した場合、電荷を持つ Bose 粒子系と類似にあつかえると考えられる。この場合の自由エネルギーは、複素秩序パラメーター Ψ を使って表すと、

$$F - F_n = \int dr \left[a|\Psi|^2 + \frac{1}{2}b|\Psi|^4 + \frac{\hbar^2}{4m} \left| \left(\nabla - \frac{2ie}{\hbar c} \mathbf{A} \right) \Psi \right|^2 + \frac{1}{8\pi} (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right] \quad (5.1)$$

ここで、 \mathbf{A} は磁場を表すベクトルポテンシャルである。また電子対ということ considering、質量を $2m$ 、電荷を $2e$ としている。

上記の GL 方程式は以下のゲージ変換

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &\rightarrow \mathbf{A} + \nabla\chi \\ \Psi &\rightarrow \exp\left(\frac{2ie}{\hbar c}\chi\right)\Psi \end{aligned} \quad (5.2)$$

で不変である。

ここで Ψ, Ψ^*, \mathbf{A} に微小な変化 $\delta\Psi, \delta\Psi^*, \delta\mathbf{A}$ を与えたとき, 自由エネルギー F におきる 1 次の変化は

$$\begin{aligned} \delta F = & \int d\mathbf{x} \frac{1}{4\pi} \delta\mathbf{A} \left\{ \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} - \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \right\} \\ & + \int d\mathbf{x} \delta\Psi^* \left\{ -\frac{\hbar^2}{4m} \left(\nabla - \frac{2ie}{\hbar c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi + a\Psi + b|\Psi|^2\Psi \right\} \\ & + h.c. + \text{表面積分} \end{aligned} \quad (5.3)$$

ここで

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar e}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \nabla \Psi^* \Psi) - \frac{2e^2}{2mc} |\Psi|^2 \mathbf{A} \quad (5.4)$$

である。

表面で $\delta\Psi = \delta\mathbf{A} = 0$ とおいたとき, 自由エネルギーの極小条件 $\delta F = 0$ が満たされるためには

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad (5.5)$$

$$\frac{\hbar^2}{4m} \left(\nabla - \frac{2ie}{\hbar c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi = a\Psi + b|\Psi|^2\Psi \quad (5.6)$$

でなければならない。ここで (5.5) は Maxwell の方程式の 1 つであり, (5.6) は Ginzburg-Landau 方程式である。

5.1.2 コヒーレンス長

まず磁場が無い場合を扱い, ゲージを $\mathbf{A} \equiv 0$ と選ぶ。空間的变化が無い場合の (5.6) 式の平衡値は $a > 0$ では $\Psi_0 = 0$ で, $a < 0$ では

$$|\Psi_0| = \left(\frac{|a|}{b} \right)^{1/2} \quad (5.7)$$

である。これ以降は $a < 0$ の場合を扱う。

次に空間的变化を考慮し, Ψ が平衡値 Ψ_0 から微小にずれたとする ($\Psi = \Psi_0 + \Psi_1$)。これを (5.6) 式に代入し, Ψ_1 の 1 次の項までで線形化すると

$$\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} \approx \frac{2\Psi_1}{\xi^2}, \quad \therefore \Psi_1 \propto \exp(\pm\sqrt{2}x/\xi) \quad \left(\xi \equiv \left(\frac{\hbar^2}{4m|a|} \right)^{1/2} \right) \quad (5.8)$$

ξ をコヒーレンス長とよぶ。

5.1.3 凝縮 Cooper 対の超流動

次に磁場が有限の場合を考える．磁場がそれほど大きくない場合には $|\Psi|$ は平衡値に近いと考えられる．この場合 Ψ を絶対値 $\rho^{1/2}$ と位相 θ に分けて

$$\Psi = \sqrt{\rho} \exp(i\theta) \quad (5.9)$$

と書く．

電流の (5.4) は次のようになる．

$$\mathbf{j} = 2e\rho\mathbf{v}_s \quad (5.10)$$

$$\mathbf{v}_s = \frac{\hbar}{2m} \nabla\theta - \frac{e}{mc} \mathbf{A} \quad (5.11)$$

(5.10) は単位体積あたり ρ 個の凝縮 Cooper 対が速度 \mathbf{v}_s で動くことによって電流が流れるというように解釈できる．この解釈の妥当性を確認するため，(5.9) を自由エネルギーの表式 (5.1) に代入すると

$$F - F_n = \int d\mathbf{x} \left[a\rho + \frac{1}{2}b\rho^2 + m\rho v_s^2 + \frac{B^2}{8\pi} + \frac{\hbar^2}{4m\rho} \left(\frac{\partial\rho}{\partial\mathbf{x}} \right)^2 \right] \quad (5.12)$$

絶対値 ρ の空間変動が緩やかな場合は

$$F - F_n = \int d\mathbf{x} \left[a\rho + \frac{1}{2}b\rho^2 + m\rho v_s^2 + \frac{B^2}{8\pi} \right] \quad (5.13)$$

つまり電子系の自由エネルギーは，磁場の無いときに比べて，単位体積あたり $m\rho v_s^2$ (Cooper 対が速度 \mathbf{v}_s で動いているための運動エネルギー) だけ増えている．

5.1.4 ロンドン方程式

(5.11) の回転をとると

$$\nabla \times \mathbf{v}_s = -\frac{e}{mc} \nabla \times \mathbf{A} = -\frac{e}{mc} \mathbf{B} \quad (5.14)$$

これから

$$\nabla \times \mathbf{j} = -\left(\frac{c}{4\pi\lambda^2} \right) \mathbf{B} \quad (5.15)$$

となる．これをロンドン (London) 方程式 (1935) と呼ぶ．ここで

$$\lambda = \left(\frac{mc^2}{8\pi\rho e^2} \right)^{1/2} = \left(\frac{mc^2 b}{8\pi e^2 |a|} \right)^{1/2} \quad (5.16)$$

は磁場侵入長と呼ばれる．

5.1.5 マイスナー効果

マックスウェル方程式

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad (5.17)$$

とロンドン方程式を組み合わせると、

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{B} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{B}) - \nabla^2 \mathbf{B}$$

をつかって

$$\lambda^2 \nabla^2 \mathbf{B} = \mathbf{B} \quad (5.18)$$

$$\lambda^2 \nabla^2 \mathbf{j} = \mathbf{j} \quad (5.19)$$

をえる。

例えば yz 平面を表面として $x > 0$ の部分に超伝導体が広がっており、 $x < 0$ の部分は真空とする。磁場は z 方向を向いて x のみの関数であるとする。超伝導体の十分内部 $x \rightarrow \infty$ で有界である磁場と、対応する電流は以下のようなになる。

$$B = H_s \exp(-x/\lambda), \quad (5.20)$$

$$j_y(x) = \left(\frac{c}{4\pi\lambda} \right) H \exp(-x/\lambda) \quad (5.21)$$

つまり、超伝導体の表面から磁場侵入長 λ はいると磁束密度は0になる。これをマイスナー (Meissner) 効果 (1933) とよぶ。

5.1.6 磁束の量子化

$$\begin{aligned} \int B_z dx dy &= \int (\nabla \times \mathbf{A})_z dx dy = \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} \\ &= \frac{\hbar c}{e} \oint \nabla \theta \cdot d\mathbf{l} = 2\pi n \frac{\hbar c}{e} = n\Phi_0 \end{aligned} \quad (5.22)$$

5.1.7 第1種超伝導体

磁場を強くしていくと、一様なマイスナー状態から常伝導状態に移行することが考えられる。超伝導状態での自由エネルギーの利得は

$$F - F_n = -\frac{a^2}{2b}V \quad (5.23)$$

磁場が排除されたことによるエネルギーと等しくなると、超伝導状態が不安定になる。

$$F - F_n = -\frac{V}{8\pi}H_c^2 \quad (5.24)$$

したがって熱力学的臨界磁場は

$$H_c = \left(\frac{4\pi a^2}{b}\right)^{1/2} \quad (5.25)$$

5.1.8 第2種超伝導体

物質によっては磁場を強くしたさいに、一様なマイスナー状態と常伝導状態の間に、超伝導が部分的に壊れて磁束が侵入する中間相が生じる場合がある。これを第2種超伝導体とよぶ。

マイスナー効果で磁場排除 $-B^2$ のエネルギー増大
磁束 Φ_0 が中に入る $-$ 外の磁場低下
面積 S 中に1本の磁束

$$\Delta E_m = \frac{1}{2\mu_0} \left(B - \frac{\Phi_0}{S}\right)^2 S - \frac{1}{2\mu_0} B^2 \approx -\frac{1}{\mu_0} B\Phi_0 \quad (5.26)$$

磁束のエネルギー

$$\epsilon_0 \approx \frac{1}{2\mu_0} \left(\frac{\Phi_0}{\lambda^2}\right)^2 \lambda^2 \approx \frac{\Phi_0^2}{\mu_0 \lambda^2} \quad (5.27)$$

したがって

$$B > \frac{\Phi_0}{\lambda^2} \quad (5.28)$$

で、磁束が超伝導体内部に侵入する。この時の磁場

$$H_{c1} = \frac{\Phi_0}{\mu_0 \lambda^2} \quad (5.29)$$

を第1臨界磁場とよぶ。

磁場がさらに強くなり、磁束どうしの間隔がコヒーレンス長程度になると、超伝導が完全に壊れる。この時の磁場

$$H_{c2} \approx \frac{\Phi_0}{\mu_0 \xi^2} \quad (5.30)$$

を第2臨界磁場とよぶ。

以上の条件 $H_{c1} < H_{c2}$ から分かるように、第2種超伝導体は

$$\xi < \lambda \quad (5.31)$$

の時に成立する。

5.2 超伝導における Bogoliubov 変換 と BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) 理論 (1957)

体積有限で、離散的な運動量を持つ系を考える。第2量子化されたハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \mu \right) \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} - \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \hat{c}_{\mathbf{k}_4, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_3, \downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_2, \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}_1, \uparrow} \quad (5.32)$$

となる。 $g > 0$ は電子間に働く引力の強さを表すパラメーターである。化学ポテンシャル μ は電子密度から決めるべきものであるが、引力が弱い場合には自由電子気体の Fermi エネルギー $\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ に等しい。そこで以下

$$\xi(\mathbf{k}) = \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m} - \frac{\hbar k_F^2}{2m} \quad (5.33)$$

と書くことにする。引力は Fermi 面近くの電子の間にも働くものとする。相互作用項の和は、波数ベクトルが

$$|\xi(\mathbf{k})| \leq \hbar \omega_D \quad (5.34)$$

と言う領域に制限するものとする。

相互作用項は4個の生成消滅演算子からなる。このうちの2個の積をその平均値で置き換えてしまうのが平均場近似である。電子対 (Cooper pair) 凝縮が起きる場合には、 $\langle \hat{c} \hat{c} \rangle$ または $\langle \hat{c}^\dagger \hat{c}^\dagger \rangle$ の期待値が残る。

5.2. 超伝導における Bogoliubov 変換 と BCS(Bardeen-Cooper-Schrieffer) 理論 (1957)87

平均場近似をすると、

$$\begin{aligned} \hat{H} \approx & \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}} \\ & - \sum_{\mathbf{k}} (\Delta \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} + \Delta^* \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}) + \frac{|\Delta|^2 V}{g} \end{aligned} \quad (5.35)$$

ただし Δ は複素数のパラメーターで

$$\Delta = \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \rangle \quad (5.36)$$

で定義されている。 Δ は次のように大きさと位相部分に分離できる。

$$\Delta = |\Delta| \exp(i2\theta) \quad (5.37)$$

ところで、ボゴリューボフ変換のユニタリ演算子

$$\hat{U}_B \equiv \exp \left(\sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) (e^{-i2\theta} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} - e^{i2\theta} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger}) \right) \quad (5.38)$$

をとると、

$$\begin{aligned} \hat{U}_B^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} \hat{U}_B &= \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} \cos \eta(\mathbf{k}) + \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} e^{i2\theta} \sin \eta(\mathbf{k}) \\ \hat{U}_B^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{U}_B &= \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \cos \eta(\mathbf{k}) - \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} e^{i2\theta} \sin \eta(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (5.39)$$

となる。

ハミルトニアン (5.35) をボゴリューボフ変換すると

$$\begin{aligned} \hat{U}_B^{\dagger} \hat{H} \hat{U}_B \approx & \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \{ \xi(\mathbf{k}) \cos 2\eta(\mathbf{k}) - |\Delta| \sin 2\eta(\mathbf{k}) \} \\ & + (e^{i2\theta} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} + e^{-i2\theta} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}) \{ -\xi(\mathbf{k}) \sin 2\eta(\mathbf{k}) - |\Delta| \cos 2\eta(\mathbf{k}) \} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{ -\xi(\mathbf{k}) (\cos 2\eta(\mathbf{k}) - 1) + |\Delta| \sin 2\eta(\mathbf{k}) \} + \frac{|\Delta|^2 V}{g} \end{aligned} \quad (5.40)$$

ここで上式のパラメーター $\eta(\mathbf{k})$ にたいして c -数項が極小となる条件

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \eta(\mathbf{k})} \{ \xi(\mathbf{k}) \cos 2\eta(\mathbf{k}) - |\Delta| \sin 2\eta(\mathbf{k}) \} \\ & = 2 \{ \xi(\mathbf{k}) \sin 2\eta(\mathbf{k}) + |\Delta| \cos 2\eta(\mathbf{k}) \} = 0 \end{aligned} \quad (5.41)$$

をとる。これは (5.40) の $\hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}}^\dagger$, $\hat{c}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}}$ の係数が 0 という条件とも一致する。

すると、

$$\tan 2\eta(\mathbf{k}) = -\frac{|\Delta|}{\xi(\mathbf{k})}, \quad (\mathbf{k} \neq 0) \quad (5.42)$$

または、

$$\begin{aligned} \cos 2\eta(\mathbf{k}) &= \frac{\xi(\mathbf{k})}{\sqrt{\xi(\mathbf{k})^2 + |\Delta|^2}}, \\ \sin 2\eta(\mathbf{k}) &= -\frac{|\Delta|}{\sqrt{\xi(\mathbf{k})^2 + |\Delta|^2}} \end{aligned} \quad (5.43)$$

が得られる。

結局ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \hat{U}_B^\dagger \hat{H} \hat{U}_B = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} E(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + E_g, \\ E(\mathbf{k}) &= \sqrt{\xi(\mathbf{k})^2 + |\Delta|^2}, \end{aligned} \quad (5.44)$$

となる。

ところで、ボゴリューボフ変換されたハミルトニアン (5.44) \hat{H}' (あるいは準粒子の系) にたいする真空を考える。

$$(\hat{H}' - E_g)|0\rangle = 0 \quad (5.45)$$

元のハミルトニアン (5.35) に対しては基底状態は

$$\hat{U}_B|0\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (\cos \eta(\mathbf{k}) - \exp(i2\theta) \sin \eta(\mathbf{k}) c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger) |0\rangle \quad (5.46)$$

と表される。

すると、

$$\Delta = \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}} \langle 0 | \hat{U}_B^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{U}_B | 0 \rangle \quad (5.47)$$

したがって

$$\Delta = \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\Delta|}{2\sqrt{\xi(\mathbf{k})^2 + |\Delta|^2}} \exp(i2\theta) \quad (5.48)$$

5.2. 超伝導における Bogoliubov 変換 と BCS(Bardeen-Cooper-Schrieffer) 理論 (1957)89

5.2.1 弱結合近似

フェルミ面における状態密度を N_F とする。

$$N_F = \frac{mk_F}{2\pi^2\hbar^2} = \frac{3n}{4\epsilon_F} \quad (5.49)$$

すると、(5.48) を連続化して、 $|\Delta| \ll \hbar\omega_D$ として、

$$\begin{aligned} 1 &= gN_F \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{(\xi^2 + |\Delta|^2)^{1/2}} \\ &= gN_F \int_0^{\hbar\omega_D/|\Delta|} \frac{dx}{(x^2 + 1)^{1/2}} \\ &= gN_F [\ln(x + (x^2 + 1)^{1/2})]_0^{\hbar\omega_D/|\Delta|} \\ &= gN_F \ln \left[\frac{\hbar\omega_D}{|\Delta|} + \left\{ \left(\frac{\hbar\omega_D}{|\Delta|} \right)^2 + 1 \right\}^{1/2} \right] \\ &\approx gN_F \ln(2\hbar\omega_D/|\Delta|) \end{aligned} \quad (5.50)$$

よって

$$|\Delta| = 2\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{1}{gN_F}\right) \quad (5.51)$$

付録 A 演算子の公式

A.1 演算子の計算規則

量子力学の演算子の演算規則は、行列に類似している。ただし、通常の行列とは異なり、有限次元とは限らない(例:ボソンの生成消滅演算子)。

1. 演算子の積のエルミート共役での順序

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \quad (\text{A.1})$$

2. 演算子の積の逆演算の順序

$$(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1} \quad (\text{A.2})$$

3. 交換関係

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (\text{A.3})$$

について、以下のことが成立する。

(a)

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}] \quad (\text{A.4})$$

(b) 線形性: 複素数 μ, ν にたいして

$$[\hat{A}, \mu\hat{B} + \nu\hat{C}] = \mu[\hat{A}, \hat{B}] + \nu[\hat{A}, \hat{C}] \quad (\text{A.5})$$

(c)

$$[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = -[\hat{A}^\dagger, \hat{B}^\dagger] \quad (\text{A.6})$$

(d)

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad (\text{A.7})$$

(e) Jacobi の恒等式

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0 \quad (\text{A.8})$$

4. 複数の演算子は通常交換しない .

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A} \quad (\text{A.9})$$

5. 演算子 \hat{X} とそれをベキ乗したもの \hat{X}^m は交換する .

$$[\hat{X}, \hat{X}^m] = 0 \quad (\text{A.10})$$

6. 演算子 \hat{X} の関数 $f(\hat{X})$ は, Taylor 展開可能ならば ($f(\hat{X}) = \sum_m a_m \hat{X}^m$) 元の演算子と交換する .

$$[\hat{X}, f(\hat{X})] = 0 \quad (\text{A.11})$$

7. 反交換関係

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \quad (\text{A.12})$$

について, 以下のことが成立する .

(a)

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \{\hat{B}, \hat{A}\} \quad (\text{A.13})$$

(b) 線形性: 複素数 μ, ν にたいして

$$\{\hat{A}, \mu\hat{B} + \nu\hat{C}\} = \mu\{\hat{A}, \hat{B}\} + \nu\{\hat{A}, \hat{C}\} \quad (\text{A.14})$$

(c)

$$\{\hat{A}, \hat{B}\}^\dagger = \{\hat{A}^\dagger, \hat{B}^\dagger\} \quad (\text{A.15})$$

(d)

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \{\hat{A}, \hat{B}\}\hat{C} - \hat{B}\{\hat{A}, \hat{C}\} \quad (\text{A.16})$$

A.2 Baker-Hausdorff の補助定理

演算子 \hat{G}, \hat{A} と複素数 λ に対し、

$$\begin{aligned} & \exp(\hat{G}\lambda)\hat{A}\exp(-\hat{G}\lambda) \\ &= \hat{A} + \lambda[\hat{G}, \hat{A}] + \left(\frac{\lambda^2}{2!}\right)[\hat{G}, [\hat{G}, \hat{A}]] + \left(\frac{\lambda^3}{3!}\right)[\hat{G}, [\hat{G}, [\hat{G}, \hat{A}]]] + \dots \quad (\text{A.17}) \end{aligned}$$

が成り立つ。

A.3 Baker-Campbell-Hausdorff の公式

交換子 $[\hat{X}, \hat{Y}]$ が \hat{X}, \hat{Y} と交換する時 ($[\hat{X}, [\hat{X}, \hat{Y}]] = [\hat{Y}, [\hat{X}, \hat{Y}]] = 0$)、 $\exp(t\hat{X})\exp(t\hat{Y})$ を計算しよう。

$$\exp(t\hat{X})\exp(t\hat{Y}) = \exp\left(t(\hat{X} + \hat{Y}) + \frac{t^2}{2}[\hat{X}, \hat{Y}]\right) \quad (\text{A.18})$$

付録B フーリエ展開

B.1 有限 Fourier 級数に関する公式

$$\sum_{l=0}^{N-1} \exp(i(k - k')la) = N\delta_{k,k'} \quad (\text{B.1})$$

ここで, k は

$$k = \frac{2\pi n}{Na}, \quad (n \text{ は整数で } -N/2 \leq n < N/2) \quad (\text{B.2})$$

である.

[証明]

- $k \neq k'$

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{N-1} \exp(i(k - k')la) &= \sum_{l=0}^{N-1} (\exp(i(k - k')a))^l \\ &= \frac{1 - \exp(i(k - k')aN)}{1 - \exp(i(k - k')a)} = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

ここで, 等比級数に対する和の公式と, $kNa = 2\pi n$ を使った.

- $k = k'$

$$\sum_{l=0}^{N-1} \exp(i(k - k')la) = \sum_{l=0}^{N-1} 1 = N \quad (\text{B.4})$$

付録C 粒子数，位相と不確定性関係

C.1 位相演算子と不確定性 (Dirac)

エルミート演算子 \hat{N} (粒子数に対応) と $\hat{\theta}$ (位相に対応) にたいし，次の正準交換関係

$$[\hat{N}, \hat{\theta}] = i \quad (\text{C.1})$$

が成り立つとする．さらに $\hat{\theta}$ に位相としての周期性を考慮し

$$\hat{\theta} \equiv \hat{\theta} + 2\pi \quad (\text{C.2})$$

とする．この周期性をもつ演算子として $\exp(\pm i\hat{\theta})$ をとると，(C.1) 式から

$$\exp(\mp i\hat{\theta})\hat{N}\exp(\pm i\hat{\theta}) = \hat{N} \mp 1 \quad (\text{C.3})$$

または

$$[\hat{N}, \exp(\pm i\hat{\theta})] = \mp \exp(\pm i\hat{\theta}) \quad (\text{C.4})$$

なので， $\exp(\pm i\hat{\theta})$ は昇降演算子と見なせ， \hat{N} の固有値は整数となる．

さらに、後で示す不確定性関係と交換関係の定理 (C.10) から

$$\Delta n \Delta \theta \geq 1/2, \quad \Delta n \equiv \sqrt{\langle (\Delta \hat{N})^2 \rangle}, \quad \Delta \theta \equiv \sqrt{\langle (\Delta \hat{\theta})^2 \rangle} \quad (\text{C.5})$$

と言う位相 $\hat{\theta}$ と数 \hat{N} の不確定性関係が成り立つ．

次に生成消滅演算子との関係を考え，形式的に

$$\hat{a} = \exp(i\hat{\theta})\sqrt{\hat{N}}, \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\hat{N}}\exp(-i\hat{\theta}) \quad (\text{C.6})$$

と定義してみよう．すると，

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \exp(i\hat{\theta})\hat{N}\exp(-i\hat{\theta}) - \hat{N} = 1 \quad (\text{C.7})$$

で (C.4) を使って示すことができる)，生成消滅演算子の交換関係を満たしている．

C.2 問題

しかし、前記の議論には問題がある。 \hat{N} の固有値はすべての整数だが、 $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ の固有値は 0 または正の整数である。この矛盾の起こる原因は、 \hat{N} の固有値が負を含む場合 $\sqrt{\hat{N}}$ がエルミート演算子ではなくなることによる。

逆に生成消滅演算子の系から、(C.6) で位相演算子を定義しようとすると、

$$\langle m | \hat{a} | n \rangle = \sqrt{n} \langle m | \exp(i\hat{\theta}) | n \rangle \quad \therefore \sqrt{n} \delta_{m,n-1} = \sqrt{n} \langle m | \exp(i\hat{\theta}) | n \rangle \quad (\text{C.8})$$

となり、行列要素 $\langle m | \exp(i\hat{\theta}) | 0 \rangle$ が不定で、位相演算子がうまく定義できない。

ディラックの方法では位相演算子は厳密には定義できないが、個数の期待値が十分大きい古典極限 ($n \gg 1$) では古典的位相の概念と一致する。

なお、粒子数 \hat{N} が 0 に近い時でも成り立つ位相演算子の定義はいくつか提案されている (Susskind and Glogower, Pegg and Barnett)。

C.3 不確定性関係と交換関係

演算子に対し平均からのずれを考えよう。

$$\Delta \hat{A} \equiv \hat{A} - \langle \chi | \hat{A} | \chi \rangle \quad (\text{C.9})$$

$(\Delta \hat{A})^2$ の期待値は分散と呼ばれる。

2 つの自己エルミート演算子 \hat{A}, \hat{B} と任意の状態ベクトル $|\chi\rangle$ にたいし、次の関係が成り立つ。

$$\langle \chi | (\Delta \hat{A})^2 | \chi \rangle \langle \chi | (\Delta \hat{B})^2 | \chi \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle \chi | [\hat{A}, \hat{B}] | \chi \rangle|^2 \quad (\text{C.10})$$

[証明] シュワルツの不等式

$$|\langle a | b \rangle|^2 \leq \langle a | a \rangle \langle b | b \rangle \quad (\text{C.11})$$

に $|a\rangle = \Delta \hat{A} |\chi\rangle, |b\rangle = \Delta \hat{B} |\chi\rangle$ を代入し、 $\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}$ のエルミート性を使うと

$$\langle \chi | (\Delta \hat{A})^2 | \chi \rangle \langle \chi | (\Delta \hat{B})^2 | \chi \rangle \geq |\langle \chi | \Delta \hat{A} \Delta \hat{B} | \chi \rangle|^2 \quad (\text{C.12})$$

が得られる。

ところで、

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = \frac{1}{2}[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} \quad (\text{C.13})$$

である。交換子 $[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}]$ は反エルミートのなので、期待値は純虚数である。反交換子 $\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}$ はエルミートのなので、実数の期待値を持つ。

すると、

$$|\langle\chi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\chi\rangle|^2 = \frac{1}{4}|\langle\chi|[\hat{A}, \hat{B}]|\chi\rangle|^2 + \frac{1}{4}|\langle\chi|\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}|\chi\rangle|^2 \quad (\text{C.14})$$

で、右辺第2項が0又は正より不等式 (C.10) が成立する。