

第二量子化に関するノート (Fermion のみ)

永井佑紀

平成 17 年 4 月 30 日

この note では、Fermion にのみ話を絞る。

1 第二量子化の概要

多体系の波動関数はスレーター行列式で書き表すことができる (Hartree-Fock 近似ですで使用)。スレーター行列式を用いた Hartree-Fock 近似に関しては、それについて述べた note があるのでそちらを参照。

スレーター行列式を具体的に計算するのはわずらわしくて不便なので、何かほかの表現法があればそちらを使いたいところである。それが第二量子化による数表示である。違いは、

- スレーター行列式: 軌道に番号をつけて、それぞれの粒子に番号を割り振る。例 : (1,3,5)
- 第二量子化: すべての軌道を用意して、そこに何個の粒子が入っているかを順番に表示する。例 : (1,0,1,0,1)

である。どちらでもあらわしていることは同じである。第二量子化が優れている点は、fermion の場合に軌道に一つずつしか入らないということを考えたときに、絶対零度ではエネルギーの低い順に (1,1,1,1,...,0,0,0) のように電子が詰まっていくことがイメージしやすい等という点がある。基本的にはスレーター行列式よりもわずらわしくないというのに利点がある。

fermion のときに注意しなければいけないのは、スレーター行列式による波動関数を $\Phi_{(k_1 \dots k_N)}$ と書くことにすると、

$$\Phi_{(k_1 k_2 \dots k_N)} = -\Phi_{(k_2 k_1 \dots k_N)} \quad (1)$$

であることである。粒子の入れ替えに対して反対称性を持つということからの帰結である。新しい表示方法を採用したとしても、この関係を満たしてなければならない。また、軌道に適当な番号付けをして、 $k_1 < k_2 < \dots < k_N$ という順番にしたとき、 $\Phi_{(k_1 \dots k_N)}$ を $\Phi_{\{n_k\}}$ と書くことにしておく。この $\Phi_{\{n_k\}}$ を、スレーター行列式が満たす関係をそのままにしたままスレーター行列式以外で書く方法が、第二量子化という方法である。

1.1 生成演算子と消滅演算子

次の性質を満たす演算子 a_k 、 a_k^\dagger を各軌道に対して考える。

$$\{a_k, a_{k'}^\dagger\} \equiv a_k a_{k'}^\dagger + a_{k'}^\dagger a_k = \delta_{kk'} \quad (2)$$

$$\{a_k, a_{k'}\} \equiv a_k a_{k'} + a_{k'} a_k = 0 \quad (3)$$

$$\{a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger\} \equiv a_k^\dagger a_{k'}^\dagger + a_{k'}^\dagger a_k^\dagger = 0 \quad (4)$$

ただし、 a_k と a_k^\dagger は互いにエルミート共役な演算子である。上の括弧式は対称積といわれるものである。

また、ある k に対して、

$$n_k = a_k^\dagger a_k \quad (5)$$

という演算子を考えておく。詳細な議論は教科書に譲るとして、ある軌道 k におけるそれぞれの演算子の意味は以下ようになる。

- a_k : 「消滅演算子」粒子数を一個減らす演算子 (粒子数を減らした状態を返す)
- a_k^\dagger : 「生成演算子」粒子数を一個増やす演算子 (粒子数を増やした状態を返す)
- n_k : 粒子数を求める演算子 (その固有値が粒子数を返す)

プログラムにおける命令みたいなものを考えればわかりやすいかもしれない。

1.2 スレーター行列式との比較

以上で定義した演算子を用いると、本当にスレーター行列式に対応する波動関数を書くことができるのだろうか。それを調べることにしよう。

まず重要な状態として、すべての k に対して n_k の固有値が 0 である状態を $|0\rangle$ と書くことにする。これは粒子がどこにもないという状態を意味しているので、真空状態と呼ぶこともある。つまり、

$$a_k |0\rangle = 0 \quad (6)$$

である。fermion であれば、各軌道の固有値は 0 または 1 しかとれない。したがって、真空状態に対してある k の生成演算子を作用させると、その軌道に電子がいることを示すことになる。つまり、

$$\Phi_{(k_1 \dots k_N)} = a_{k_1}^\dagger \dots a_{k_N}^\dagger |0\rangle \quad (7)$$

という関数を作ると、それは軌道に電子がいる状態を示すことがわかる。この関数は、行列式と同じ性質をもっている。粒子を入れ替える操作は演算子の順番をひっくり返すことに相当し、それは対称積から関数の符号を変えるということを意味している。つまり、反対称性をうまく記述している。その他の行列式の性質も持っていることは、「多体問題」(新物理学シリーズ)の 30 ページを参照すればわかる。

このような演算子を用いてハミルトニアンを構成するわけだが、そのときに、一粒子の波動関数を演算子化したものを用いてハミルトニアンを表記することもできる。

2 第二量子化における任意の演算子

任意の演算子を a_k^\dagger 、 a_k であらわす必要がある。詳しくは、「多体問題」を参照。この節においては、教科書の補足を行う。

基本的な考え方としては、いままで用いてきた演算子に対応する演算子に置き換える際、いままで用いてきた演算子の性質をすべて満たせばよいということである。ここでは、構成した新しい演算子の意味について考える。

2.1 一体の演算子

まず、

$$F(x_1, \dots, x_N) = \sum_{j=1}^N f(x_j) \quad (8)$$

という一体の演算子を考える。このときの昇降演算子による対応する表示は、

$$\hat{F} = \sum_k \sum_{k'} \langle k | f | k' \rangle a_k^\dagger a_k \quad (9)$$

と書ける。なぜそう書けるのかは教科書に譲るとして、意味を考えてみることにする。

この演算子の行列要素を考えてみる。演算子は各粒子に関する演算子の和で書けており、各粒子に関する演算子は、各粒子の固有関数にのみ作用する。つまり、この演算子の行列要素は、各粒子に関する演算子のおおのの行列要素の和で書ける。したがって、行列要素をとったときに、各粒子に関する演算子の行列要素の和になるように演算子が構成されていけばよい。ここで、そもそもある軌道に粒子が存在していなければ（波動関数にその軌道の固有関数が含まれていなければ）、その軌道に関する演算子の期待値を足す必要がないということに注意しておく。

作られた演算子を見てみよう。これを昇降演算子で表されている波動関数 (7) に作用させると、ある軌道 k' に粒子がいる場合は消滅し、粒子がない場合は波動関数が 0 になることがわかる。つまり、作用させたときに波動関数が「生き残っていれば」、その軌道 k' の行列要素を足す必要があるということがわかる。軌道 k に関する行列要素の和をとるわけだから、左からすべての k に関して $\langle k |$ を作用させてみればよい。

もう少し具体的に考えてみる。まず最初に、粒子がその状態（軌道）にいるかどうか k' を変えて走査してみる。もし存在していれば、さらに k を変えて、値を持つ行列要素を探してみる。たとえば、ある状態 k' においては、

- $\langle k_1 | f | k' \rangle$
- $\langle k_3 | f | k' \rangle$
- $\langle k_4 | f | k' \rangle$

が値を持っていたとする。これが意味するのは、 $|k'\rangle$ は演算子 f の固有関数ではないということであり、演算子 f を作用させたことにより、 $|k'\rangle$ は $|k_1\rangle$ 、 $|k_3\rangle$ 、 $|k_4\rangle$ の線形結合にばらけたということである。つまり、電子は三つの軌道にまたがって存在しているということになる。

いるかいないかを確認するために粒子を消滅させてしまった。したがって、付け戻す必要がある。前述のとおりであれば、電子は行列要素の値のある状態へばらけたわけであるから、それに対応した状態に付け戻してやればよい。つまり、前の例でいうと、 $|k_1\rangle$ 、 $|k_3\rangle$ 、 $|k_4\rangle$ を作り出せばよいということになる。

もし、演算子がハミルトニアンであれば、各粒子の固有関数は各粒子のハミルトニアンを対角化しているから、ある軌道 k' に粒子がいれば、付け戻すときは k' でよい。したがって、和が簡単になる。

2.2 二体の演算子

第二量子化におけるハミルトニアンでわかりにくいのは、二粒子相互作用ポテンシャルの項であると思う。しかし、一体の演算子の物理的意味をもとに考えれば、二体の演算子の物理的意味を明らかにすることができると思われる。

まず、二体の演算子 F_2 を

$$F_2(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N f_2(x_i, x_j) \quad (10)$$

という形とする。ここでの因子 $1/2$ は、 i と j の組み合わせと j と i の組み合わせで二重に加えることを考えたため存在している。このとき、第二量子化における演算子 \hat{F}_2 は、

$$\hat{F}_2 = \frac{1}{2} \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{k'_1} \sum_{k'_2} \langle k_1 | \langle k_2 | f_2 | k'_2 \rangle | k'_1 \rangle a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k'_2} a_{k'_1} \quad (11)$$

と書ける。表式が似ているので、一体の演算子と同じように考えることは可能であろう。二体の相互作用であるから、始状態のとき軌道 k'_1 と k'_2 にいた二粒子は、相互作用によって軌道 k'_1 と k'_2 に飛び移る。つまり、 k'_1 と k'_2 の粒子を消滅演算子によって消滅させてから（消滅させる粒子がない場合はもちろん波動関数が 0 になる）、生成演算子によって k_1 と k_2 に粒子を生成させる。

ここで、粒子を二つ消滅させ二つ生成するので、生成のルートが二種類あることに注意しなければならない。つまり、軌道 k'_1 の粒子は k_1 の軌道へも k_2 の軌道へも飛び移れるということである。もちろん、演算子 f_2 のその飛び移りに対応する行列要素が値を持っているときの話である。生成のルートが二種類あることにより、いわゆる「交換相互作用」というものが生まれる。スレーター行列式ではわかりにくかった「交換相互作用」が第二量子化法では比較的わかりやすい。正確には、この演算子 \hat{F}_2 を何かに作用させたときに「交換相互作用」が生まれると言ったほうがよいかもしれない。