第二量子化法におけるHartree-Fock近似に関するノート

永井佑紀

平成17年5月13日

第二量子化のハミルトニアンを用いて、Hartree-Fock 近似を書き直す。

生成消滅演算子の物理的意味をなるべくわかるようにノートを構成するつもりである。このノートは全面的に「多体問題」（新物理学シリーズ）にのっとって書く。第二量子化と Hartree-Fock 近似については、前のノートを参照。

1 変分法

第二量子化のハミルトニアンは、

$$H = \sum_{k',k} < k|h|k' > a_k^\dagger a_{k'} + \frac{1}{2}\sum_{k_1,k_2}\sum_{k_1',k_2'} < k_1| < k_2|v|k_2' > |k_1' > a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k_2'} a_{k_1'} \tag{1}$$

という形をとることにする。これは、各粒子のハミルトニアンと二体の相互作用ポテンシャルからなっている。粒子の総数が N のとき、このハミルトニアンの基底状態の波動関数として

$$\Phi = a_{k_1}^\dagger \cdots a_{k_N}^\dagger |0 > \tag{2}$$

をとる。これは、粒子がフェルミオンであり、ある軌道の生成演算子はひとつずつしか存在しないからである。また k は、$k_i < k_j$ を満たすように並んでいればよく、具体的な k_i の分布はどのようでもよい（基底状態がどのようになるか求めるためにこれからこの k_i の分布を求めるのだから）。このとき、

$$W =< \Phi|H|\Phi > \tag{3}$$

を最小にすることを考える。ハミルトニアンは二項の和なので、第一項を H_1、第二項を H_2 として

$$W = W_1 + W_2 =< \Phi|H_1|\Phi > + < \Phi|H_2|\Phi > \tag{4}$$

と書き、それぞれを計算することにする。まず W_1 には、

$$W_1 =< 0|a_{k_N} \cdots a_{k_1} \sum_{k',k} < k|h|k' > a_k^\dagger a_{k'} a_{k_1}^\dagger \cdots a_{k_N}^\dagger |0 > \tag{5}$$

となる。ここですべての k' に関しての和をとるのだが、$a_{k'}$ が作用していることに注意したい。基底状態には N 個の軌道の生成演算子が含まれている。そのときの最大の k は k_N である。し

たがって、$k' > k_N$ においては $a_{k'}|0>=0$ であるから、和は N までとればよいことがわかる。また、一粒子ハミルトニアン h は対角化されているため、$k=k'$ である。つまり、ハミルトニアン h をある軌道 k' に作用させても、粒子は軌道を飛び移らず依然として k' の軌道にいるということである（$|k'>$ は h の固有状態ということである。当たり前である)。それゆえに非対角項は 0 になる。また、$a^{\dagger}_{k} = a^{\dagger}_{k'}$ であるから、消した粒子をそのまま付け加えていることになる。以上から、

$$W_1 = \sum_{i=1}^{N} < k_i|h|k_i > \tag{6}$$

であることがわかる。

W_2 についてであるが、第二量子化に関する note において言及しているとおり、二体の演算子の場合、飛び移る先が k_2 か k_1 であるから、項としては二つ出てくる。また、生成演算子は反交換関係 $a^{\dagger}_{k_i} a^{\dagger} k_j = -a^{\dagger}_{k_j} a^{\dagger}_{k_i}$ を満たす。以上から、交換相互作用項では正負が変化する。そのことに注意してあとは W_1 と同様に計算すると、

$$W_2 = \frac{1}{2} \sum_{i,j\neq 1}^{N} \sum^{N} \{< k_i| < k_j|v|k_j > |k_j > - < k_i|k_j|v|k_i > |k_j >\} \tag{7}$$

となる。よって、W は、

$$W = \sum_{i=1}^{N} < k_i|h|k_i > + \frac{1}{2} \sum_{i,j\neq 1}^{N} \sum^{N} \{< k_i| < k_j|v|k_j > |k_j > - < k_i|k_j|v|k_i > |k_j >\} \tag{8}$$

となる。これを最小にする軌道を求めればよいのであるが、どんなポテンシャルであれエネルギーの低いほうから順番に N 個の電子をつめていけばよいことは前と同じである。

1.1 Hartree-Fock 近似におけるハミルトニアン

ノート「Green 関数の求め方」に記載。