

# 演算子の二次形式で表現されたハミルトニアン の物理量について

永井佑紀

平成 27 年 2 月 6 日

ハミルトニアンがフェルミオンの生成演算子と消滅演算子の組で書かれている場合、そのハミルトニアンを行列で考えるといろいろと見通しがよい。

## 1 ハミルトニアン

ハミルトニアンが  $L$  種類のフェルミオンの演算子の二次形式：

$$H = \sum_{ij} h_{ij} c_i^\dagger c_j \quad (1)$$

で書けているとする。このとき、 $c_i^\dagger$  はある状態  $i$  の電子を生成する演算子である。このとき、固有値方程式は

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (2)$$

である。もしハミルトニアンが

$$H = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} \quad (3)$$

と対角化できるとすれば<sup>1</sup>、 $N$  個粒子が存在しているときの基底状態  $|g\rangle$  は、 $a_{\alpha}^{\dagger}$  をエネルギー  $\epsilon_{\alpha}$  が小さい順に真空に作用させたもの：

$$|g\rangle = \prod_{\alpha=1}^N a_{\alpha}^{\dagger} |0\rangle \quad (4)$$

となる。ここで、 $|0\rangle$  は  $a_{\alpha}|0\rangle = 0$  となる真空である。また、 $N$  番目の一番大きなエネルギーを  $\epsilon_F$  と定義する。実際、ハミルトニアンをこの基底状態に作用させると、

$$H|g\rangle = \sum_{\alpha} \prod_{\alpha'=1}^N \epsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} a_{\alpha'}^{\dagger} |0\rangle \quad (5)$$

$$= \sum_{\alpha, \epsilon_{\alpha} \leq \epsilon_F} \epsilon_{\alpha} \prod_{\alpha'=1}^N a_{\alpha'}^{\dagger} |0\rangle \quad (6)$$

$$= \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} \prod_{\alpha'=1}^N a_{\alpha'}^{\dagger} |0\rangle \quad (7)$$

となり、確かに固有状態となっている。

この  $a_{\alpha}^{\dagger}$  で生成されるフェルミ粒子を準粒子と呼べば、この準粒子のハミルトニアンは式 (3) で表されるので、自由粒子である。したがって、この自由粒子の粒子数期待値は

$$\sum_{\alpha} \langle a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} \rangle = f(\epsilon_{\alpha}) \quad (8)$$

と書ける。 $f(x) = 1/(1 + e^{x/T})$  はフェルミ分布関数である。

<sup>1</sup> $L$  は固有値の数。

## 2 行列による表示

式 (1) を行列の形で表示する事を考えよう。  $L$  次元ベクトルとして

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_L \end{pmatrix} \quad (9)$$

を導入すると、ハミルトニアンは

$$H = \mathbf{c}^\dagger \hat{h} \mathbf{c} \quad (10)$$

と書ける。ここで、行列  $\hat{h}$  はエルミート行列であり、

$$[\hat{h}]_{ij} = h_{ij} \quad (11)$$

である。

次に、 $\hat{h}$  を対角化することを考える。エルミート行列はユニタリー行列で対角化できるので、

$$\hat{U}^\dagger \hat{h} \hat{U} = \hat{D} \quad (12)$$

というユニタリー行列  $\hat{U}$  と対角行列  $\hat{D}$  が存在する。よって、

$$\hat{h} = \hat{U} \hat{D} \hat{U}^\dagger \quad (13)$$

である。これをハミルトニアンの表式に代入すると、

$$H = \mathbf{c}^\dagger \hat{U} \hat{D} \hat{U}^\dagger \mathbf{c} \quad (14)$$

$$= \mathbf{a}^\dagger \hat{D} \mathbf{a} \quad (15)$$

となる。ここで、

$$\mathbf{a} = \hat{U}^\dagger \mathbf{c} \quad (16)$$

を導入した。式 (15) を成分表示すると

$$H = \sum_{ij} a_i^\dagger D_{ij} a_j \quad (17)$$

$$= \sum_i a_i^\dagger D_{ii} a_i \quad (18)$$

となり、結局、

$$D_{ii} = \epsilon_i \quad (19)$$

となっており、行列  $\hat{h}$  を対角化すると、もとのハミルトニアンの対角化を行う事ができる。

## 3 期待値

次に、生成演算子と消滅演算子が一つずつ現れる物理量の期待値を計算してみよう。このような物理量を

$$n_{ij} = \langle c_i^\dagger c_j \rangle \quad (20)$$

とする。この  $n_{ij}$  を成分とする行列  $\hat{n}$  は、

$$\hat{n} = \langle \mathbf{c}^* \mathbf{c}^T \rangle \quad (21)$$

と書く事ができる。この行列をベクトル  $a$  を使って書き直すと、

$$\hat{n} = \langle (\hat{U} \mathbf{a})^* (\hat{U} \mathbf{a})^T \rangle \quad (22)$$

$$= \hat{U}^* \langle \mathbf{a}^* \mathbf{a}^T \rangle \hat{U}^T \quad (23)$$

これを成分表示すると、

$$n_{ij} = \sum_{lm} \hat{U}_{il}^* \langle a_l^\dagger a_m \rangle \hat{U}_{jm} \quad (24)$$

となるが、生成演算子  $a_i^\dagger$  で生成される準粒子は自由粒子なので、

$$\langle a_l^\dagger a_m \rangle = \delta_{lm} f(E_l) \quad (25)$$

である。よって、

$$n_{ij} = \sum_{lm} \hat{U}_{il}^* \delta_{lm} f(E_l) \hat{U}_{jm} \quad (26)$$

$$= \sum_l \hat{U}_{il}^* \hat{U}_{jl} f(E_l) \quad (27)$$

となる。もし、 $i = j$  であれば、

$$n_i = \sum_l |U_{il}|^2 f(E_l) \quad (28)$$

であり、これはまさに局所粒子数密度に他ならない。

つまり、数値計算等で二次形式のハミルトニアン の粒子数密度を計算する場合には、ただ行列を対角化してやればよい。

## 4 超伝導と南部形式

### 4.1 正常および異常粒子密度

次に、上述の話を超伝導に応用する。超伝導を記述する平均場理論はBCS理論であるが、そのハミルトニアン (BdG ハミルトニアン) は、電子とホールの空間を用意した  $2L$  次元の南部空間を用いて、

$$H^s = \psi^\dagger \check{h}_s \psi \quad (29)$$

$$\check{h}_s \equiv \begin{pmatrix} \hat{H} & \hat{\Delta} \\ \hat{\Delta}^\dagger & -\hat{H}^* \end{pmatrix} \quad (30)$$

と書く事ができる。ここで、 $2L$  次元のベクトル  $\psi$  は

$$\psi = \begin{pmatrix} \mathbf{c} \\ \mathbf{c}^* \end{pmatrix} \quad (31)$$

である。

ギャップ方程式を解いて自己無撞着に  $\hat{\Delta}$  を求める場合には、異常粒子密度

$$n_{ij}^A \equiv \langle c_i c_j \rangle \quad (32)$$

が必要となる。この量は、 $2L \times 2L$  の行列

$$\tilde{N} = \begin{pmatrix} \langle \mathbf{c}^* \mathbf{c}^T \rangle & \langle \mathbf{c}^* \mathbf{c}^\dagger \rangle \\ \langle \mathbf{c} \mathbf{c}^T \rangle & \langle \mathbf{c} \mathbf{c}^\dagger \rangle \end{pmatrix} \quad (33)$$

$$= \langle \boldsymbol{\psi}^* \boldsymbol{\psi}^T \rangle \quad (34)$$

と、ハミルトニアン行列  $\check{h}_s$  を対角化するユニタリー行列

$$\hat{P}^\dagger \check{h}_s \check{P} = \check{D}_s \quad (35)$$

と用いると、先ほどと同様に計算する事ができ、

$$\check{N}_{ij} = \sum_l \check{P}_{il}^* \check{P}_{jl} f(E_l^s) \quad (36)$$

となる。

## 4.2 電子ホール対称性

次に、超伝導の BdG ハミルトニアンには電子ホール対称性があることを示し、これを用いるとより整理されることを示す。まず、 $2L \times 2L$  のハミルトニアン行列  $\check{h}_s$  の固有ベクトルを

$$\phi = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix} \quad (37)$$

とすると、BdG ハミルトニアンは

$$\hat{H} \mathbf{u} + \Delta \mathbf{v} = E \mathbf{u} \quad (38)$$

$$\Delta^\dagger \mathbf{u} - \hat{H}^* \mathbf{v} = E \mathbf{v} \quad (39)$$

という固有値問題となる。ここで、両辺の複素共役をとって整理すると

$$\hat{H}^* \mathbf{u}^* + \Delta^* \mathbf{v}^* = E \mathbf{u}^* \quad (40)$$

$$\Delta^T \mathbf{u}^* - \hat{H} \mathbf{v}^* = E \mathbf{v}^* \quad (41)$$

$$\hat{H} \mathbf{v}^* + \Delta \mathbf{u}^* = -E \mathbf{v}^* \quad (42)$$

$$\Delta^\dagger \mathbf{v}^* - \hat{H}^* \mathbf{u}^* = -E \mathbf{u}^* \quad (43)$$

となり、ベクトル

$$\begin{pmatrix} \mathbf{v}^* \\ \mathbf{u}^* \end{pmatrix} \quad (44)$$

はエネルギー  $-E$  の固有ベクトルであることがわかる。従って、ユニタリー行列  $\check{P}$  は

$$\check{P} = \begin{pmatrix} \hat{U} & \hat{V}^* \\ \hat{V} & \hat{U}^* \end{pmatrix} \quad (45)$$

と書く事ができ、

$$\hat{P}^\dagger \check{h}_s \check{P} = \begin{pmatrix} \hat{E}_s & 0 \\ 0 & -\hat{E}_s \end{pmatrix} \quad (46)$$

となることがわかる。ここで、

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 & \cdots & \mathbf{u}_L \end{pmatrix} \quad (47)$$

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 & \cdots & \mathbf{v}_L \end{pmatrix} \quad (48)$$

とした。

以上より、

$$n^A = \langle \mathbf{c} \mathbf{c}^T \rangle \quad (49)$$

$$= \hat{V}^* f(\hat{E}_s) U^T + \hat{U} f(-\hat{E}_s) V^\dagger \quad (50)$$

となる。ここで、 $f(\hat{E}_s)$  は対角成分が  $E_s^l$  の対角行列である。結局、成分表示すると、

$$n_{ij}^A = \sum_l [V_{il}^* U_{jl} f(E_s^l) + U_{il} f(-E_s^l) V_{jl}^*] \quad (51)$$

$$= \sum_l [[\mathbf{v}_l]_i^* [\mathbf{u}_l]_j f(E_s^l) + [\mathbf{u}_l]_i [\mathbf{v}_l]_j^* f(-E_s^l)] \quad (52)$$

となり、よく見かける  $\langle c_i c_j \rangle$  の表式になる。

つまり、数値計算では、ただ  $\hat{h}_s$  を対角化すればよい。