初稿公開日: 2021 年 8 月 13 日
最終更新日: 2024 年 11 月 15 日
日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター 久保勝規

第二量子化

第一量子化で波動関数を（反）対称化したものと第二量子化の等価性を、演算子の作用を確かめることによって示す。

記法

$$
\begin{aligned}
n_1(i)\, n_N &= n_1 \cdots n_{i-1} n_{i+1} \cdots n_N, \\
n_1(i_1, i_2)\, n_N &= \begin{cases} n_1 \cdots n_{i_1-1} n_{i_1+1} \cdots n_{i_2-1} n_{i_2+1} \cdots n_N & \text{for } i_1 < i_2 \\ n_1 \cdots n_{i_2-1} n_{i_2+1} \cdots n_{i_1-1} n_{i_1+1} \cdots n_N & \text{for } i_1 > i_2 \end{cases}.
\end{aligned}
$$

のように略記する。

場の演算子

場の演算子を

$$\Psi(x) \equiv \sum_i \phi_i(x) c_i,$$

と定義する。ここで $\phi_1(x), \phi_2(x), \cdots$ は正規直交基底とする。また、

$$
\begin{aligned}
&[c_i, c_j^\dagger]_\pm \equiv c_i c_j^\dagger \mp c_j^\dagger c_i = \delta_{ij}, \\
&[c_i, c_j]_\pm = 0,
\end{aligned}
$$

を満たすとする。上の符号はボース粒子の場合、下の符号はフェルミ粒子の場合である。

$$[\Psi(x), c_i^\dagger]_\pm = \sum_j \phi_j(x) [c_j, c_i^\dagger]_\pm = \phi_i(x).$$

$$[\Psi(x), \Psi^\dagger(x')]_\pm = \sum_i [\Psi(x), c_i^\dagger]_\pm \phi_i^*(x') = \sum_i \phi_i(x) \phi_i^*(x').$$

ところで、

$$\int dx' \sum_i \phi_i(x) \phi_i^*(x')\, \phi_j(x') = \phi_j(x),$$

であるから

$$[\Psi(x), \Psi^\dagger(x')]_\pm = \delta(x - x').$$

基底波動関数

N 体の状態として

$$|n_1 \cdots n_N\rangle \equiv c_{n_1}^\dagger \cdots c_{n_N}^\dagger |0\rangle,$$

を考える。これは N 体の状態の基底になる。ここで $|0\rangle$ は粒子のいない状態（真空状態）である。ボース粒子の場合は、この式では一般的には規格化されていないが、気にしない。このノートでは以下でも一貫して、規格化はしない。また、場の演算子で作られる N 体の状態を

$$|x_1 \cdots x_N\rangle \equiv \Psi^\dagger(x_1) \cdots \Psi^\dagger(x_N)|0\rangle,$$

とする。N 体の基底波動関数を

$$\psi_{n_1 \cdots n_N}(x_1, \cdots, x_N) = \langle x_1 \cdots x_N | n_1 \cdots n_N\rangle,$$

とする。定義からこれは（反）対称化されている。一粒子演算子の計算と完全性の証明のために、N 体の基底波動関数を 1 体の基底波動関数と $N-1$ 体の基底波動関数に分解しておく。

$$\begin{aligned}
\psi_{n_1 \cdots n_N}(x_1, \cdots, x_N) &= \langle x_1 \cdots x_N | n_1 \cdots n_N\rangle \\
&= (\pm 1)^{i+1} \langle x_1 (i)\, x_N | \Psi(x_i) c_{n_1}^\dagger \cdots c_{n_N}^\dagger |0\rangle \\
&= (\pm 1)^{i+1} \langle x_1 (i)\, x_N | [\phi_{n_1}(x_i) \pm c_{n_1}^\dagger \Psi(x_i)] c_{n_2}^\dagger \cdots c_{n_N}^\dagger |0\rangle \\
&= (\pm 1)^{i+1} \big\{ \phi_{n_1}(x_i) \langle x_1 (i)\, x_N | n_2 \cdots n_N\rangle \\
&\quad \pm \langle x_1 (i)\, x_N | c_{n_1}^\dagger [\phi_{n_2}(x_i) \pm c_{n_2}^\dagger \Psi(x_i)] c_{n_3}^\dagger \cdots c_{n_N}^\dagger |0\rangle \big\} \\
&= \sum_k (\pm 1)^{i+k} \phi_{n_k}(x_i) \langle x_1 (i)\, x_N | n_1 (k)\, n_N\rangle.
\end{aligned}$$

二粒子演算子の計算のために、N 体の基底波動関数を 2 体の基底波動関数と $N-2$ 体の基底波動関数に分解しておく。$N \geq 2$ であれば、$i_1 \neq i_2$ として

$$\begin{aligned}
&\psi_{n_1 \cdots n_N}(x_1, \cdots, x_N) \\
&= \langle x_1 \cdots x_N | n_1 \cdots n_N\rangle \\
&= (\pm 1)^{i_1+i_2+\theta(i_2-i_1)} \langle x_1 (i_1, i_2)\, x_N | \Psi(x_{i_2}) \Psi(x_{i_1}) c_{n_1}^\dagger \cdots c_{n_N}^\dagger |0\rangle \\
&= \sum_{k_1 \neq k_2} (\pm 1)^{i_1+i_2+\theta(i_2-i_1)+k_1+k_2+\theta(k_2-k_1)} \phi_{n_{k_1}}(x_{i_1}) \phi_{n_{k_2}}(x_{i_2}) \langle x_1 (i_1, i_2)\, x_N | n_1 (k_1, k_2)\, n_N\rangle \\
&= \sum_{k_1 \neq k_2} (\pm 1)^{\alpha(i_1,i_2)+\alpha(k_1,k_2)} \phi_{n_{k_1}}(x_{i_1}) \phi_{n_{k_2}}(x_{i_2}) \langle x_1 (i_1, i_2)\, x_N | n_1 (k_1, k_2)\, n_N\rangle.
\end{aligned}$$

ここで $\theta(i)$ はステップ関数で、$\alpha(i_1, i_2) = i_1 + i_2 + \theta(i_2 - i_1)$ とした。

完全性

$$\langle x|i\rangle = \langle 0|\Psi(x)c_i^\dagger|0\rangle = \phi_i(x).$$

$$\int dx\,|x\rangle\langle x|\,i\rangle = \int dx\sum_j \phi_j^*(x)c_j^\dagger|0\rangle\phi_i(x) = c_i^\dagger|0\rangle = |i\rangle.$$

よって、一粒子状態に対しては

$$\int dx\,|x\rangle\langle x| = 1.$$

任意の $|n_1\cdots n_{N-1}\rangle$ に対して

$$\frac{1}{(N-1)!}\int dx_1\cdots dx_{N-1}|x_1\cdots x_{N-1}\rangle\langle x_1\cdots x_{N-1}|n_1\cdots n_{N-1}\rangle = |n_1\cdots n_{N-1}\rangle,$$

が成り立つとき

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{N!}\int dx_1\cdots dx_N|x_1\cdots x_N\rangle\langle x_1\cdots x_N|n_1\cdots n_N\rangle \\
&= \frac{1}{N!}\int dx_1\cdots dx_N\sum_i \phi_i^*(x_1)c_i^\dagger|x_2\cdots x_N\rangle\sum_k(\pm1)^{k+1}\phi_{n_k}(x_1)\langle x_2\cdots x_N|n_1(k)\,n_N\rangle \\
&= \frac{1}{N}\int dx_1\sum_i \phi_i^*(x_1)c_i^\dagger\sum_k(\pm1)^{k+1}\phi_{n_k}(x_1)|n_1(k)\,n_N\rangle \\
&= \frac{1}{N}\sum_k(\pm1)^{k+1}c_{n_k}^\dagger|n_1(k)\,n_N\rangle \\
&= \frac{1}{N}\sum_k|n_1\cdots n_N\rangle \\
&= |n_1\cdots n_N\rangle.
\end{aligned}$$

よって N 体状態に対して

$$\frac{1}{N!}\int dx_1\cdots dx_N|x_1\cdots x_N\rangle\langle x_1\cdots x_N| = 1.$$

ここで $N!$ が現れるのは、例えば 2 体の場合 $|x_1x_2\rangle$ と $|x_2x_1\rangle$ は（符号を除いて）同じ状態であるが、上の式では両方とも取り入れているためである。このような数えすぎをしないように積分区間を決めてやれば、$N!$ の係数を無くした定式化もできる。

一粒子演算子

第二量子化での一粒子演算子を

$$\hat{T} \equiv \int dy\, \Psi^\dagger(y) T(y) \Psi(y),$$

と定義する。これを $|n_1 \cdots n_N\rangle$ に演算した状態の波動関数は

$$\begin{aligned}
&\langle x_1 \cdots x_N|\hat{T}|n_1 \cdots n_N\rangle \\
&= \int dy\, \frac{1}{N!} \int dx'_1 \cdots dx'_N \langle x_1 \cdots x_N|\Psi^\dagger(y)T(y)\Psi(y)|x'_1 \cdots x'_N\rangle\langle x'_1 \cdots x'_N|n_1 \cdots n_N\rangle.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Psi(y)|x'_1 \cdots x'_N\rangle &= \Psi(y)\Psi^\dagger(x'_1) \cdots \Psi^\dagger(x'_N)|0\rangle \\
&= [\delta(x'_1 - y) \pm \Psi^\dagger(x'_1)\Psi(y)]\Psi^\dagger(x'_2) \cdots \Psi^\dagger(x'_N)|0\rangle \\
&= \delta(x'_1 - y)|x'_2 \cdots x'_N\rangle \\
&\ \pm \Psi^\dagger(x'_1)[\delta(x'_2 - y) \pm \Psi^\dagger(x'_2)\Psi(y)]\Psi^\dagger(x'_3) \cdots \Psi^\dagger(x'_N)|0\rangle \\
&= \sum_j (\pm 1)^{j+1}\delta(x'_j - y)|x'_1 (j)\, x'_N\rangle.
\end{aligned}$$

$$\langle x_1 \cdots x_N|\Psi^\dagger(y)T(y)\Psi(y)|x'_1 \cdots x'_N\rangle = \sum_{ij} (\pm 1)^{i+j}\delta(x_i - y)T(y)\delta(x'_j - y)\langle x_1 (i)\, x_N|x'_1 (j)\, x'_N\rangle.$$

$$\begin{aligned}
&\langle x_1 \cdots x_N|\hat{T}|n_1 \cdots n_N\rangle \\
&= \int dy\, \frac{1}{N!} \int dx'_1 \cdots dx'_N \sum_{ij} (\pm 1)^{i+j}\delta(x_i - y)T(y)\delta(x'_j - y)\langle x_1 (i)\, x_N|x'_1 (j)\, x'_N\rangle \\
&\times \sum_k (\pm 1)^{j+k}\phi_{n_k}(x'_j)\langle x'_1 (j)\, x'_N|n_1 (k)\, n_N\rangle \\
&= \sum_{ijk} \frac{1}{N}(\pm 1)^{i+k} \int dy \int dx'_j\, \delta(x_i - y)T(y)\delta(x'_j - y)\phi_{n_k}(x'_j)\langle x_1 (i)\, x_N|n_1 (k)\, n_N\rangle \\
&= \sum_{ijk} \frac{1}{N}(\pm 1)^{i+k} \int dy\, \delta(x_i - y)T(y)\phi_{n_k}(y)\langle x_1 (i)\, x_N|n_1 (k)\, n_N\rangle \\
&= \sum_{ik} (\pm 1)^{i+k} \int dy\, \delta(x_i - y)T(y)\phi_{n_k}(y)\langle x_1 (i)\, x_N|n_1 (k)\, n_N\rangle \\
&= \sum_{ik} (\pm 1)^{i+k} T(x_i)\phi_{n_k}(x_i)\langle x_1 (i)\, x_N|n_1 (k)\, n_N\rangle \\
&= \sum_i T(x_i)\psi_{n_1 \cdots n_N}(x_1, \cdots, x_N) = T(x_1, \cdots, x_N)\psi_{n_1 \cdots n_N}(x_1, \cdots, x_N).
\end{aligned}$$

ここで、$T(x_1, \cdots, x_N) = \sum_i T(x_i)$ とした。

二粒子演算子

第二量子化での二粒子演算子を

$$\hat{V} \equiv \frac{1}{2}\int dy_1 dy_2 \Psi^\dagger(y_1)\Psi^\dagger(y_2)V(y_1,y_2)\Psi(y_2)\Psi(y_1),$$

と定義する。$N \geq 2$ として、これを $|n_1 \cdots n_N\rangle$ に演算した状態の波動関数は

$$\begin{aligned}
&\langle x_1 \cdots x_N|\hat{V}|n_1 \cdots n_N\rangle \\
&= \frac{1}{2}\int dy_1 dy_2 \frac{1}{N!}\int dx'_1 \cdots dx'_N \, \langle x_1 \cdots x_N|\Psi^\dagger(y_1)\Psi^\dagger(y_2)V(y_1,y_2)\Psi(y_2)\Psi(y_1)|x'_1 \cdots x'_N\rangle \\
&\times \langle x'_1 \cdots x'_N|n_1 \cdots n_N\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Psi(y_2)\Psi(y_1)|x'_1 \cdots x'_N\rangle &= \Psi(y_2)\Psi(y_1)\Psi^\dagger(x'_1)\cdots\Psi^\dagger(x'_N)|0\rangle \\
&= \sum_{j_1 \neq j_2} (\pm 1)^{j_1+j_2+\theta(j_2-j_1)}\delta(x'_{j_1}-y_1)\delta(x'_{j_2}-y_2)|x'_1(j_1,j_2)\,x'_N\rangle \\
&= \sum_{j_1 \neq j_2} (\pm 1)^{\alpha(j_1,j_2)}\delta(x'_{j_1}-y_1)\delta(x'_{j_2}-y_2)|x'_1(j_1,j_2)\,x'_N\rangle.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\langle x_1 \cdots x_N|\Psi^\dagger(y_1)\Psi^\dagger(y_2)V(y_1,y_2)\Psi(y_2)\Psi(y_1)|x'_1 \cdots x'_N\rangle \\
&= \sum_{i_1 \neq i_2, j_1 \neq j_2} (\pm 1)^{\alpha(i_1,i_2)+\alpha(j_1,j_2)} \\
&\times \delta(x_{i_1}-y_1)\delta(x_{i_2}-y_2)V(y_1,y_2)\delta(x'_{j_1}-y_1)\delta(x'_{j_2}-y_2)\langle x_1(i_1,i_2)\,x_N|x'_1(j_1,j_2)\,x'_N\rangle.
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&\langle x_1 \cdots x_N | \hat{V} | n_1 \cdots n_N \rangle \\
&= \frac{1}{2} \int dy_1 dy_2 \, \frac{1}{N!} \int dx'_1 \cdots dx'_N \sum_{i_1 \neq i_2, j_1 \neq j_2} (\pm 1)^{\alpha(i_1, i_2) + \alpha(j_1, j_2)} \\
&\quad \times \delta(x_{i_1} - y_1) \delta(x_{i_2} - y_2) V(y_1, y_2) \delta(x'_{j_1} - y_1) \delta(x'_{j_2} - y_2) \langle x_1 (i_1, i_2) \, x_N | x'_1 (j_1, j_2) \, x'_N \rangle \\
&\quad \times \sum_{k_1 \neq k_2} (\pm 1)^{\alpha(j_1, j_2) + \alpha(k_1, k_2)} \phi_{n_{k_1}}(x'_{j_1}) \phi_{n_{k_2}}(x'_{j_2}) \langle x'_1 (j_1, j_2) \, x'_N | n_1 (k_1, k_2) \, n_N \rangle \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i_1 \neq i_2, j_1 \neq j_2, k_1 \neq k_2} \frac{1}{N(N-1)} (\pm 1)^{\alpha(i_1, i_2) + \alpha(k_1, k_2)} \int dy_1 dy_2 \int dx'_{j_1} dx'_{j_2} \\
&\quad \times \delta(x_{i_1} - y_1) \delta(x_{i_2} - y_2) V(y_1, y_2) \delta(x'_{j_1} - y_1) \delta(x'_{j_2} - y_2) \phi_{n_{k_1}}(x'_{j_1}) \phi_{n_{k_2}}(x'_{j_2}) \\
&\quad \times \langle x_1 (i_1, i_2) \, x_N | n_1 (k_1, k_2) \, n_N \rangle \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i_1 \neq i_2, j_1 \neq j_2, k_1 \neq k_2} \frac{1}{N(N-1)} (\pm 1)^{\alpha(i_1, i_2) + \alpha(k_1, k_2)} \int dy_1 dy_2 \\
&\quad \times \delta(x_{i_1} - y_1) \delta(x_{i_2} - y_2) V(y_1, y_2) \phi_{n_{k_1}}(y_1) \phi_{n_{k_2}}(y_2) \langle x_1 (i_1, i_2) \, x_N | n_1 (k_1, k_2) \, n_N \rangle \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i_1 \neq i_2, k_1 \neq k_2} (\pm 1)^{\alpha(i_1, i_2) + \alpha(k_1, k_2)} \int dy_1 dy_2 \\
&\quad \times \delta(x_{i_1} - y_1) \delta(x_{i_2} - y_2) V(y_1, y_2) \phi_{n_{k_1}}(y_1) \phi_{n_{k_2}}(y_2) \langle x_1 (i_1, i_2) \, x_N | n_1 (k_1, k_2) \, n_N \rangle \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i_1 \neq i_2, k_1 \neq k_2} (\pm 1)^{\alpha(i_1, i_2) + \alpha(k_1, k_2)} V(x_{i_1}, x_{i_2}) \phi_{n_{k_1}}(x_{i_1}) \phi_{n_{k_2}}(x_{i_2}) \langle x_1 (i_1, i_2) \, x_N | n_1 (k_1, k_2) \, n_N \rangle \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i_1 \neq i_2} V(x_{i_1}, x_{i_2}) \psi_{n_1 \cdots n_N}(x_1, \cdots, x_N) \\
&= V(x_1, \cdots, x_N) \psi_{n_1 \cdots n_N}(x_1, \cdots, x_N).
\end{aligned}
$$

ここで、$V(x_1, \cdots, x_N) = \frac{1}{2} \sum_{i_1 \neq i_2} V(x_{i_1}, x_{i_2})$ とした。

一般の波動関数

任意の N 体の状態は $\{|n_1 \cdots n_N\rangle\}$ の重ね合わせで書き表すことができる。それを $|\psi\rangle$、波動関数を $\langle x_1 \cdots x_N|\psi\rangle = \psi(x_1, \cdots, x_N)$ と書くことにする。

$$
\begin{aligned}
\langle x_1 \cdots x_N|\hat{T}|\psi\rangle &= T(x_1, \cdots, x_N)\psi(x_1, \cdots, x_N), \\
\langle x_1 \cdots x_N|\hat{V}|\psi\rangle &= V(x_1, \cdots, x_N)\psi(x_1, \cdots, x_N).
\end{aligned}
$$

演算子の期待値

$$
\begin{aligned}
\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle &= \frac{1}{N!}\int dx_1 \cdots dx_N \langle\psi|x_1 \cdots x_N\rangle\langle x_1 \cdots x_N|\hat{O}|\psi\rangle \\
&= \frac{1}{N!}\int dx_1 \cdots dx_N\, \psi^*(x_1, \cdots, x_N)O(x_1, \cdots, x_N)\psi(x_1, \cdots, x_N), \\
\langle\psi|\psi\rangle &= \frac{1}{N!}\int dx_1 \cdots dx_N \langle\psi|x_1 \cdots x_N\rangle\langle x_1 \cdots x_N|\psi\rangle \\
&= \frac{1}{N!}\int dx_1 \cdots dx_N\, \psi^*(x_1, \cdots, x_N)\psi(x_1, \cdots, x_N).
\end{aligned}
$$

$$
\frac{\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\int dx_1 \cdots dx_N\, \psi^*(x_1, \cdots, x_N)O(x_1, \cdots, x_N)\psi(x_1, \cdots, x_N)}{\int dx_1 \cdots dx_N\, \psi^*(x_1, \cdots, x_N)\psi(x_1, \cdots, x_N)}.
$$