第二量子化

$$H\Psi_{\{n_k\}} = E_{\{n_k\}}\Psi_{\{n_k\}} \qquad E_{\{n_k\}} = \sum_k \varepsilon_k n_k, \quad n_k = \begin{cases} 0 & \text{それ以外} \\ 1 & k\text{:占有} \end{cases}$$

$$H = \sum_{j=1}^{N} h(r_j)$$

$$\Updownarrow$$

$$\mathcal{H} = \sum_k \varepsilon_k \hat{n}_k \qquad \hat{n}_k = c_k^\dagger c_k$$: Hilbert空間の演算子

c_k : 一粒子状態kの電子の消滅演算子

$c_k^\dagger$: 〃 生成 〃

$$\{A, B\} = AB + BA$$

$$\{c_k, c_{k'}\} = c_k c_{k'} + c_{k'} c_k = 0 \qquad c_k c_{k'} = -c_{k'} c_k$$

反可換

$$\{c_k^\dagger, c_{k'}^\dagger\} = 0 \Rightarrow c_k^\dagger c_{k'}^\dagger = -c_{k'}^\dagger c_k^\dagger$$

$$\{c_k, c_{k'}^\dagger\} = c_k c_{k'}^\dagger + c_{k'}^\dagger c_k = \delta_{kk'}$$

調和振動子の議論　$\mathcal{H} = (\hat{n} + 1/2)$, $\hat{n} = a^\dagger a$

$\underbrace{[a, a^\dagger] = 1}_{\text{ボゾン Bose粒子}}$

フェルミオンでの対応物

$\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$, $n = 0, 1, 2, \cdots$

$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle$

$\langle n|n\rangle = 1 \leftarrow a|0\rangle = 0$

$|0\rangle$: 真空の定義

$\{c, c^\dagger\} = cc^\dagger + c^\dagger c = 1$

$cc^\dagger = 1 - c^\dagger c$

$c_k|0\rangle = 0$ すべての k について

$|1\rangle = c^\dagger|0\rangle$ 　特定の k について考える。

$c^\dagger c = \hat{n}$, $\hat{n}|1\rangle = c^\dagger \underbrace{c \cdot c^\dagger}|0\rangle = +c^\dagger(1 - c^\dagger c)|0\rangle$

$= c^\dagger|0\rangle = |1\rangle$

$|1\rangle$ は $\hat{n}$ の固有値1の固有ベクトル

$\{c^\dagger, c^\dagger\} = 0 = 2(c^\dagger)^2 \qquad (c^\dagger)^2 = 0. \qquad c^2 = 0$

$$\mathcal{H} = \sum_k \varepsilon_k \hat{n}_k \quad , \hat{n}_k = c_k^\dagger c_k$$

$$\mathcal{H} | \{n_k\} \rangle = E_{\{n_k\}} | \{n_k\} \rangle$$

$$| \{n_k\} \rangle = \prod_k (c_k^\dagger)^{n_k} | 0 \rangle$$

積は k をならべる順序を固定しておく.

たとえば $n_k = 0$

$= 1 \qquad k = k_1, k_2$ のみ

$$| \{n_k\} \rangle = c_{k_1}^\dagger c_{k_2}^\dagger | 0 \rangle$$

$\mathcal{H}$: 第二量子化したハミルトニアン

$| \{n_k\} \rangle$: 固有状態

第二量子化したハミルトニアンの書き直し

c_k : 一粒子状態 k の消滅 operator

$$h(r)\,\phi_j(\vec{r}) = \varepsilon_j\,\phi_j(\vec{r})$$

$\phi_j(\vec{r})$: 規格直交化されているとする

$$\int d^3r\; \phi_j^*(\vec{r})\,\phi_{j'}(\vec{r}) = \delta_{jj'}$$

$\phi_j(r)$

$$\sum_j \phi_j(r)\,\phi_j^*(\vec{r}') = \delta^3(\vec{r}-\vec{r}')$$ $\phi_j(\vec{r})$: 完全であるとします

任意の関数 $f(\vec{r})$: ϕ_j で展開できる

$$f(r) = \sum_j c_j\,\phi_j(\vec{r}) \quad \rightarrow \quad \phi_{j'}^*(r)$$

$$\int d^3r\,\phi_k^*(r) f(r) = \sum_j c_j \underbrace{\int d^3r\,\phi_k^*(\vec{r})\,\phi_j(\vec{r})}_{\delta_{kj}} = c_k$$

$$f(\vec{r}) = \sum_j \phi_j(r) \int d^3r'\,\phi_j^*(\vec{r}')\,f(\vec{r}') = \int d^3r' \underbrace{\left[\sum_j \phi_j(\vec{r})\,\phi_j^*(\vec{r}')\right]}_{\delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{r}')} f(\vec{r}')$$

場の演算子

$$\psi(\vec{r}) = \sum_j c_j \phi_j(\vec{r}) \quad : \text{演算子}$$

$$\int d^3r\, \psi^\dagger(r)\, h(r)\, \psi(r) = \int d^3r \sum_j \phi_j^*(\vec{r})\, c_j^\dagger \sum_{j'} c_{j'} \overbrace{h\, \phi_{j'}(r)}^{=\varepsilon_{j'} \phi_{j'}(r)}$$

$$= \sum_{j j'} \varepsilon_{j'} c_j^\dagger c_{j'} \int d^3r\, \underbrace{\phi_j^*(r)\, \phi_{j'}(r)}_{\delta_{jj'}}$$

$$= \sum_j \varepsilon_j c_j^\dagger c_j$$

$$= \sum_j \varepsilon_j \hat{n}_j = \mathcal{H}$$

$$\boxed{\mathcal{H} = \int d^3r\, \psi^\dagger(r)\, h(r)\, \psi(r)}$$

第二量子化という
言葉の起源.

(例) $V_1=0$ の場合　自由空間　特に1次元

一辺Lの周期的境界条件　$\phi(x+L)=\phi(x)$

$$h(r)=\frac{p^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2$$

$$h\phi_k=\varepsilon_k\phi_k,\quad \phi_k(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx},\quad \varepsilon_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

$$\phi(x+L)=\phi(x)\to e^{ikL}=1$$

$$k=\frac{2\pi}{L}n,\quad n=0,\pm1,\pm2\cdots$$

$$\int_0^L dx\,\phi_k^*(x)\,\phi_{k'}(x)=\frac{1}{L}\int_0^L e^{i\frac{2\pi}{L}(n-n')x}=\delta_{nn'}$$

$$\Delta k=\frac{2\pi}{L}$$

$$\sum_k \phi_k(x)\,\phi_k^*(x')=\frac{1}{L}\sum_{n=0,\pm1,\pm2\cdots}e^{i\frac{2\pi}{L}n(x-x')}$$

$$=\frac{1}{L}\frac{2\pi}{2\pi}\sum_k e^{ik(x-x')}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dk\,e^{ik(x-x')}=\delta(x-x')$$

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}\sum_k e^{ikx}c_k,\quad \mathcal{H}=\sum_k\frac{\hbar^2k^2}{2m}n_k$$