第二量子化 second quantization

だーれだ

2012 年 3 月 11 日

1 イントロ

第一量子化の多体系を復習して第二量子化を導入する。
物性の応用を目的に書いてる。
書き忘れたけど基底は全部正規直交基底で完全系をなしているつもり。

2 第一量子化での N 粒子ハミルトニアン

N 個の質量 m の**同種粒子**が相互作用する時のハミルトニアン

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{p_i}^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{i \neq j} V(\hat{r_i}, \hat{r_j})$$

ただし、$[r_i, p_j] = i\hbar\delta_{i,j}$
２個目の和の正確な意味は $\{(i,j)|i,j \in [1,N], i \neq j\}$ すべてについての和。
同じ２個のインデックスを含む項が２度出てくるので 1/2 をかけてある。

3 ヒルベルト空間

1 粒子のヒルベルト空間を H_1
N 粒子のヒルベルト空間を $H_N = \otimes_N H_1 = H_1 \otimes H_1 \cdots \otimes H_1$
と書く。
第一量子化での問題設定はこれで終わり。
i 番目のヒルベルト空間（粒子) の状態が α_i であるような H_N の状態を

$$|\alpha\rangle = |\alpha_1\rangle |\alpha_2\rangle \dots |\alpha_N\rangle$$

とか書く。

4 同種粒子の交換対称性

ここで仮定として同種粒子の交換に対する対称性を要請する。

仮定 4.1 (同種粒子の交換対称性)**.** 系の状態は i 番目と j 番目の粒子を交換する演算子 $P_{i,j}$ の固有状態であり、固有値が *+1* であるものを *Boson*、*-1* であるものを *Fermion* という。

また、H は $P_{i,j}$ の作用に対して不変 (それが同種粒子ということでもある。注:ちょっと怪しい。)
つまり、$[P_{i,j}, H] = 0$
H はハミルトニアンで H_N はヒルベルト空間であることに注意!!(←自分で書いといて勘違いした。)
よって、H は $P_{i,j}$ に対する固有空間を変えないので、初期状態からユニタリ時間発展した状態はすべて Boson のままか Fermion のまま N 個の粒子を交換する演算子全体の集合 $\mathcal{P}$ は **N 次置換群**となる。

5 Fock 空間

扱っている系が Boson 系か Fermion 系か指定すると、出てくる状態は Boson 系か Fermion 系の一方のみなので、結局 H_N の一部の空間しか見ていない。
なので、その一部の空間だけを取り出し、単調な情報を捨て、占有数表示に移行する。
部分 Fock 空間 $\mathcal{F}_N$ とは

部分 Fock 空間

$$\mathcal{F}_N = \{|\alpha\rangle \mid |\alpha\rangle \in H_N, P \in \mathcal{P}, P|\alpha\rangle = \xi|\alpha\rangle\}$$

ただし、ξ は boson では +1、Fermion では $sgnP$

である。
部分 Fock 空間の基底は占有数表示でグローバルゲージ自由度を除いて一意に表示できる。

占有数表示 (Occupation number representation

H_0 の基底として $\{|e_i\rangle\,(i = 1 \sim s)\}$ を取ると、H_N の基底は $\{|e_{i1}\rangle |e_{i2}\rangle \dots |e_{iN}\rangle\}$ と書ける。
これらの基底の占有数表示とは

$$|e_{i1}\rangle |e_{i2}\rangle \dots |e_{iN}\rangle \rightarrow (N_1, N_2, \dots, N_s)$$

ただし、N_l は $\{e_{ik}\}$ のうち $ik = l$ を満たすものの数。
この単射な対応によって（実は後で導入する $\mathcal{F}$ によって全単射となる。) 基底を表現する。
これを占有数表示といい、$|N_1, N_2, \dots, N_s\rangle$ などと書く。
また、部分 Fock 空間 $\mathcal{F}_N$ に対する占有数表示では $\displaystyle\sum_{i=1}^{s} N_s = N$ である。

次に、Creation/Annihilation operators を導入する。

Creation/Annihilation operators

Annihilation operators (linear operators)

$$\begin{aligned} a_i &: \mathcal{F}_N \to \mathcal{F}_{N-1} \\ &: (N_1, \ldots, N_i, \ldots N_s) \to (N_1, \ldots, N_i - 1, \ldots, N_s) \end{aligned}$$

Creation operators (linear operators)

$$\begin{aligned} a_i^\dagger &: \mathcal{F}_N \to \mathcal{F}_{N+1} \\ &: (N_1, \ldots, N_i, \ldots N_s) \to (N_1, \ldots, N_i + 1, \ldots, N_s) \end{aligned}$$

Commutation relations

$$[a_i, a_j^\dagger]_\zeta = \delta i, j$$

ただし、ζ は Boson 系では +1,Fermion 系では-1 を表し、

$$[A, B]_\zeta = AB - \zeta BA$$

さらに真空状態 (null space) を

$$\mathcal{F}_0 = \{c\,|0\rangle\,|c \in \mathbb{C}, a_i\,|0\rangle = 0, \langle 0|0\rangle = 1\}$$

によって定義する。
ここで最後の 0 は実数の 0 ではなく、ベクトル空間の零元。
やっとこさ Fock 空間にたどりつきます。

Fock 空間

$$\mathcal{F} = \otimes_{i=0}^{\infty} \mathcal{F}_i$$

Fock 空間の基底の集合と $\otimes^\infty \mathcal{N}$ ($\mathcal{N}$ は非負整数全体) は占有数表示によって全単射の関係がある。
Fock 空間を用意して量子力学で遊ぶのが第二量子化
(QFT とかで使う場の演算子もこれの仲間) 後は、ハミルトニアンを Creation/Annihilation operators で書き直す。
言い忘れたけど、占有数表示は、もともとの基底とセットじゃないと意味ないってところに注意。
(何の状態を数えているのか)

6 一粒子状態, 二粒子状態

i 番目の状態に 1 個の粒子があるという状態を次の様にかける。

$$|0, \ldots, 1, \ldots,\rangle = a_i^\dagger\,|0\rangle = |i\rangle$$

i,j 番目 ($i < j$) の状態に 1 個ずつ粒子がある状態は次の様にかける。

$$|0, \ldots, i, \ldots, j, \ldots\rangle = a_i^\dagger a_j^\dagger\,|0\rangle = |i, j\rangle$$

Creation operators の定義を思い出してちょ。

7　一体演算子, 二体演算子

　めんどいので天下りで行きます。一体演算子は第二量子化で次の様に書ける。

$$\mathcal{O} = \sum_{i,j} \langle e_i | \mathcal{O}_{\prime} | e_j \rangle \, a_i^\dagger a_j$$

ここで $\mathcal{O}$ は第二量子化での演算子で $\mathcal{O}$ は一粒子ハミルトニアンでの演算子

$$\begin{aligned}
\langle i | \mathcal{O} | j \rangle &= \sum_{a,b} \langle e_a | \mathcal{O}_{\prime} | e_b \rangle \langle 0 | a_i a_a^\dagger a_b a_j^\dagger | 0 \rangle \\
&= \sum_{a,b} \langle e_a | \mathcal{O}_{\prime} | e_b \rangle \langle 0 | (\delta_{i,a} + \zeta a_a^\dagger a_i)(\delta_{j,b} + \zeta a_j^\dagger a_b) | 0 \rangle \\
&= \langle e_i | \mathcal{O}_{\prime} | e_j \rangle
\end{aligned}$$

なので任意の Fock 空間の 1 粒子状態にたいして期待値が一粒子ヒルベルト空間の一粒子状態と一致している。
二体演算子は

$$\mathcal{O} = \sum_{i,j,k,l} \langle e_i, e_j | \mathcal{O}_{\prime} | e_k, e_l \rangle \, a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l$$

ただし、$\langle e_i, e_j | = \langle 0 | \, a_j a_i$
計算は似たような感じ。

8　疑問点とか

　もっと一般的で厳密は構成法に Gelfand-Naimark-Segel construction, GNS 構成法　というのがあるらしい。

交換対称性のところは割とごまかしている。
そのうち anyon エニオンの話もしたい。

真空状態も考えているのでも第一量子化（で対称性を化した空間) よりも Fock 空間のほうが広い