フェルミオン波動関数の重なり積分

塩崎　謙

September 12, 2022

$c_j^\dagger, c_j, j = 1, \ldots, N$を反交換関係を満たす複素フェルミオンの生成・消滅演算子とする．

$$\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \quad \{c_i, c_j\} = \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0. \tag{1}$$

1　M粒子状態

$N \times M$行列A, Bに対して，M粒子状態$|A\rangle, |B\rangle$を

$$|A\rangle = (\sum_i A_{i1} c_i^\dagger)(\sum_i A_{i2} c_i^\dagger) \cdots (\sum_i A_{iM} c_i^\dagger) |0\rangle, \tag{2}$$

$$|B\rangle = (\sum_i B_{i1} c_i^\dagger)(\sum_i B_{i2} c_i^\dagger) \cdots (\sum_i B_{iM} c_i^\dagger) |0\rangle \tag{3}$$

と定義する．（以下の計算において，"$a_j^\dagger$"$= \sum_i A_{ij} c_i^\dagger$に対して反交換関係を課す必要はない．）内積$\langle A|B\rangle$を計算したい．

$$\langle A|B\rangle = \sum_{i_1,\ldots,i_M} \sum_{j_1,\ldots,j_M} A^*_{i_1 1} \ldots A^*_{i_M M} B_{j_1 1} \ldots B_{j_M M} \langle 0| c_{i_M} \ldots c_{i_1} c^\dagger_{j_1} \ldots c^\dagger_{j_M} |0\rangle \tag{4}$$

$$= \sum_{i_1,\ldots,i_M} \sum_P \mathrm{sgn}(P) A^*_{i_1 1} \ldots A^*_{i_M M} B_{P(i_1)1} \ldots B_{P(i_M)M}. \tag{5}$$

ここで，Pは$\{i_1, \ldots, i_M\}$の置換であり，$i_1, \ldots, i_M$は全て異なる組み合わせの場合のみ値を持つ．

$$B_{P(i_1)1} \ldots B_{P(i_M)M} = B_{i_{P(1)}1} \ldots B_{i_{P(M)}M} \tag{6}$$

に注意して，因子の順番を入れ替えて，

$$B_{i_{P(1)}1} \ldots B_{i_{P(M)}M} = B_{i_1 P(1)} \ldots B_{i_M P(M)} \tag{7}$$

より，結局，

$$\langle A|B\rangle = \sum_P \mathrm{sgn}(P) \sum_{i_1,\ldots,i_M} A^*_{i_1 1} \ldots A^*_{i_M M} B_{i_1 P(1)} \ldots B_{i_M P(M)} \tag{8}$$

$$= \sum_P \mathrm{sgn}(P) [A^\dagger B]_{1P(1)} \ldots [A^\dagger B]_{MP(M)} \tag{9}$$

$$= \det[A^\dagger B] \tag{10}$$

を得る．

2 BCS基底状態

$N\times N$反対称行列$A^T=-A, B^T=-B$に対して，状態$|A\rangle, |B\rangle$を

$$|A\rangle = \exp\left(\frac{1}{2}\sum_{ij} A_{ij} c_i^\dagger c_j^\dagger\right)|0\rangle, \tag{11}$$

$$|B\rangle = \exp\left(\frac{1}{2}\sum_{ij} B_{ij} c_i^\dagger c_j^\dagger\right)|0\rangle \tag{12}$$

と定義する．内積$\langle A|B\rangle$は，以下で与えられる． [1]

$$\langle A|B\rangle = (-1)^{N(N+1)/2}\mathrm{Pf}\begin{pmatrix} B & -\mathbf{1} \\ \mathbf{1} & -A^* \end{pmatrix} \tag{13}$$

コヒーレント状態$|\boldsymbol{z}\rangle$,

$$c_i|\boldsymbol{z}\rangle = z_i|\boldsymbol{z}\rangle, \quad \langle\boldsymbol{z}|c_i^\dagger = z_i^*\langle\boldsymbol{z}|, \quad i=1,\dots,N \tag{14}$$

を導入する． $z_i, z_i^*, i=1,\dots,N$,は互いに独立な$2N$個のグラスマン数である．コヒーレント状態$|\boldsymbol{z}\rangle$は，具体的には，

$$|\boldsymbol{z}\rangle = e^{-\sum_i z_i c_i^\dagger}|0\rangle = \prod_i (1 - z_i c_i^\dagger)|0\rangle, \tag{15}$$

$$\langle\boldsymbol{z}| = \langle 0|e^{-\sum_i c_i z_i^*} = \langle 0|\prod_i (1 - c_i z_i^*) \tag{16}$$

と与えられる．反交換関係$\{c_i, z_j\}=0$などに注意．完全性関係は

$$\int \prod_i dz_i^* dz_i e^{-\sum_i z_i^* z_i}|\boldsymbol{z}\rangle\langle\boldsymbol{z}| = 1. \tag{17}$$

（これは認める．）また，

$$\langle 0|\boldsymbol{z}\rangle = \langle 0|0\rangle = 1 \tag{18}$$

に注意.

すると，重なり積分は

$$\langle A|B\rangle = \int \prod_i dz_i^* dz_i e^{-\sum_i z_i^* z_i}\langle A|\boldsymbol{z}\rangle\langle\boldsymbol{z}|B\rangle \tag{19}$$

$$= \int \prod_i dz_i^* dz_i e^{-\sum_i z_i^* z_i} e^{\frac{1}{2}\sum_{ij} A_{ij}^* z_j z_i}\langle 0|\boldsymbol{z}\rangle\langle\boldsymbol{z}|0\rangle e^{\frac{1}{2}\sum_{ij} B_{ij} z_i^* z_j^*} \tag{20}$$

$$= \int \prod_i dz_i^* dz_i e^{-\sum_i z_i^* z_i} e^{\frac{1}{2}\sum_{ij} A_{ij}^* z_j z_i} e^{\frac{1}{2}\sum_{ij} B_{ij} z_i^* z_j^*} \tag{21}$$

となる．積分を実行するために，反対称行列

$$M = \begin{pmatrix} B & -1 \\ 1 & -A^* \end{pmatrix} \tag{22}$$

と，グラスマン数のベクトル$\eta = (z_1^*, \dots, z_N^*, z_1, \dots, z_N)$を導入すると，

$$\langle A|B\rangle = s_N \int (d\eta_{2N}\cdots d\eta_1) e^{\sum_{i<j} M_{ij}\eta_i\eta_j} \tag{23}$$

と書かれる．積分変数の入れ替えに伴う符号$s_N \in \pm 1$を計算すると，

$$s_N = (-1)^{N(N-1)/2}(-1)^N = (-1)^{N(N+1)/2} \tag{24}$$

となる．グラスマン数の積分部分は，可換性$[\eta_i\eta_j, \eta_k\eta_l] = 0$に注意すると，

$$\int (d\eta_{2N} \cdots d\eta_1) e^{\sum_{i<j} M_{ij}\eta_i\eta_j} = \int (d\eta_{2N} \cdots d\eta_1) \prod_{i<j} (1 + M_{ij}\eta_i\eta_j) \tag{25}$$

ここで，$\eta_1 \cdots \eta_{2N}$に比例する項だけが積分値に寄与することを考慮すると，置換群S_{2N}の部分集合として，

$$F_{2N} = \{\sigma \in S_{2N} | \sigma(2i-1) < \sigma(2i)(0 \leq i \leq N), \sigma(1) < \sigma(3) < \cdots < \sigma(2N-1)\} \tag{26}$$

を満たすものをF_{2N}と書くと，

$$\int (d\eta_{2N} \cdots d\eta_1) \prod_{i<j} (1 + M_{ij}\eta_i\eta_j) = \sum_{\sigma \in F_{2N}} \operatorname{sgn} \sigma M_{p(1)p(2)} \cdots M_{p(2N-1)p(2N)} \tag{27}$$

であるが，これは$\operatorname{Pf} M$に他ならない．よって(15)式が示された．

References

[1] L. M. Robledo, *Sign of the overlap of Hartree-Fock-Bogoliubov wave functions*, Phys. Rev. C **79**, 021302(R) (2009).