# 「動的平均場へのショートカット」数式集

## 1. ボソン・コヒーレント状態

1 次元調和振動子

$$
\begin{aligned}
H &= \hbar\omega(B^\dagger B + \frac{1}{2}) &(1)\\
&= \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}C\hat{Q}^2, &(2)\\
|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(B^\dagger)^n|0\rangle, &(3)\\
B|0\rangle &= 0. &(4)
\end{aligned}
$$

以下では $\hbar = m = \omega = 1$ とおく

$$
\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(B^\dagger + B), \quad \hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(B^\dagger - B) \tag{5}
$$

コヒーレント状態

$$
\begin{aligned}
|z\rangle &= e^{zB^\dagger - z^* B}|0\rangle &(6)\\
&= e^{-\frac{1}{2}|z|^2}e^{zB^\dagger}|0\rangle &(7)\\
&= e^{i(p\hat{Q} - q\hat{P})}|0\rangle &(8)\\
&= e^{-\frac{i}{2}qp}e^{ip\hat{Q}}e^{-iq\hat{P}}|0\rangle &(9)
\end{aligned}
$$

よく知られた公式

$$
e^{X+Y} = e^X e^Y e^{-\frac{1}{2}[X,\ Y]+\cdots} \tag{10}
$$

運動方程式

$$
\begin{aligned}
\left[H,\ B^\dagger\right] &= \hbar\omega B^\dagger, &(11)\\
[H,\ B] &= -\hbar\omega B, &(12)\\
\left[H,\ \hat{Q}\right] &= -i\hat{P}/m, &(13)\\
\left[H,\ \hat{P}\right] &= iC\hat{Q}, &(14)\\
\omega^2 &= C/m. &(15)
\end{aligned}
$$

$C \to 0$ で $\omega \to 0$　しかし $m \neq 0$ であることに注意

期待値の時間変化

$$
\begin{aligned}
q(t) &= \langle z(t)|\hat{Q}|z(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(z^*(t) + z(t)), &(16)\\
p(t) &= \langle z(t)|\hat{P}|z(t)\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(z^*(t) - z(t)). &(17)\\
z(t) &= z(0)e^{-i\omega t} &(18)
\end{aligned}
$$

# 2. Hartree-Fock 理論

場の演算子

$$\{\psi(x),\ \psi^\dagger(x')\} = \delta(x.x') \equiv \delta(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\delta_{\sigma,\sigma'}, \tag{19}$$

$$\{\psi^\dagger(x),\ \psi^\dagger(x')\} = 0, \tag{20}$$

$$\{\psi(x),\ \psi(x')\} = 0. \tag{21}$$

１粒子基底による展開

$$\psi^\dagger(x) = \sum_i \varphi_i^*(x)c_i^\dagger, \tag{22}$$

$$\psi(x) = \sum_i \varphi_i(x)c_i, \tag{23}$$

$$\varphi_i(x) = \langle x|i\rangle, \tag{24}$$

$$\{c_i,\ c_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \tag{25}$$

$$\{c^\dagger,\ c^\dagger\} = 0, \tag{26}$$

$$\{c_i,\ c_j\} = 0, \tag{27}$$

$$c_i = \int \varphi_i^*(x)\psi dx, \tag{28}$$

$$c_i^\dagger = \int \varphi_i(x)\psi^\dagger dx, \tag{29}$$

$$dx = \sum_\sigma \int d\boldsymbol{x}. \tag{30}$$

基底状態の構造

$$\begin{aligned} |\phi_{\mathrm{HF}}\rangle &= \prod_{i>0}^{A/2} c_i^\dagger c_{\bar{i}}^\dagger |0\rangle, & (31)\\ &= \prod_{i>0}((1-n_i)+n_i c_i^\dagger c_{\bar{i}}^\dagger)|0\rangle. & (32) \end{aligned}$$

$$n_i = 1 \quad \text{for} \quad e_i \leq e_F, \qquad n_i = 0 \quad \text{for} \quad e_i > e_F. \tag{33}$$

粒子・空孔 (particle-hole) 概念の導入

$$c_i^\dagger = (1-n_i)c_i^\dagger + n_i c_i^\dagger = a_i^\dagger + b_{\bar{i}}, \tag{34}$$

$$c_{\bar{i}} = (1-n_i)c_{\bar{i}} + n_i c_{\bar{i}} = a_{\bar{i}} - b_i^\dagger. \tag{35}$$

$$a_i|\phi_{\mathrm{HF}}\rangle = b_j|\phi_{\mathrm{HF}}\rangle = 0 \tag{36}$$

基底状態には particle も hole も存在しない!

$$\begin{aligned} c_i^\dagger c_j &= \langle\phi_{\mathrm{HF}}|c_i^\dagger c_j|\phi_{\mathrm{HF}}\rangle + :c_i^\dagger c_j: & (37)\\ &= \delta_{ij} + (a_i^\dagger b_j^\dagger + b_j a_i) + (a_i^\dagger a_j - b_i^\dagger b_i) & (38) \end{aligned}$$

変分原理

$$\delta\langle\phi_{\mathrm{HF}}|H|\phi_{\mathrm{HF}}\rangle = 0 \tag{39}$$

より

$$\begin{aligned}
\langle\phi_{\mathrm{HF}}|[a_i b_j,\ H]|\phi_{\mathrm{HF}}\rangle &= 0, &(40)\\
\langle\phi_{\mathrm{HF}}|[a_i^\dagger b_j^\dagger,\ H]|\phi_{\mathrm{HF}}\rangle &= 0. &(41)
\end{aligned}$$

時間変化する HF 状態

$$|\phi(t)\rangle = e^{i\hat{G}(t)}|\phi(t=0)\rangle \tag{42}$$

$$\hat{G}(t) = \sum_{ij}(g_{ij}(t)a_i^\dagger b_j^\dagger + g_{ij}^*(t)b_j a_i) \tag{43}$$

$$|\phi(t=0)\rangle = |\phi_{\mathrm{HF}}\rangle \tag{44}$$

$$\begin{aligned}
a_i(t) &= e^{i\hat{G}(t)}a_i e^{-i\hat{G}(t)}, &(45)\\
b_j(t) &= e^{i\hat{G}(t)}b_j e^{-i\hat{G}(t)} &(46)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_i(t)|\phi(t)\rangle &= 0, &(47)\\
b_i(t)|\phi(t)\rangle &= 0 &(48)
\end{aligned}$$

## 3. 対相関と BCS 理論

核子のペアー演算子

$$\begin{aligned}
A_i^\dagger &= c_i^\dagger c_{\bar{i}}^\dagger, &(49)\\
A_i &= c_{\bar{i}} c_i, &(50)\\
\hat{N}_i &= c_i^\dagger c_i + c_{\bar{i}}^\dagger c_{\bar{i}}. &(51)
\end{aligned}$$

クーパーペアーの凝縮状態

$$\begin{aligned}
A^\dagger &= \sum_i \varphi_i A_i^\dagger, &(52)\\
|\Psi\rangle &= \mathcal{N}(A^\dagger)^n|0\rangle, &(53)\\
n &= N/2. &(54)
\end{aligned}$$

BCS 状態の構造

$$\begin{aligned}
|\Psi\rangle \Rightarrow |\phi_{\mathrm{BCS}}\rangle &= \mathcal{N}e^{A^\dagger}|0\rangle &(55)\\
&= \mathcal{N}e^{\sum_i \varphi_i A_i^\dagger}|0\rangle &(56)\\
&= e^{\sum_i \frac{\theta_i}{2}(A_i^\dagger - A_i)}|0\rangle &(57)
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \prod_i e^{\frac{\theta_i}{2}(A_i^\dagger - A_i)}|0\rangle && (58)\\
&= \prod_i e^{i\theta_i \hat{S}_y^i}|0\rangle && (59)\\
&= \prod_i (u_i + v_i A_i^\dagger)|0\rangle && (60)\\
&\equiv U|0\rangle. && (61)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
u_i &= \cos(\theta_i/2), && (62)\\
v_i &= \sin(\theta_i/2). && (63)
\end{aligned}
$$

準スピン描像

$$
\begin{aligned}
S_+^i &= A_i^\dagger, && (64)\\
S_-^i &= A_i, && (65)\\
S_x^i &= \frac{1}{2}(A_i^\dagger + A_i), && (66)\\
S_y^i &= \frac{1}{2i}(A_i^\dagger - A_i), && (67)\\
S_0^i &= \frac{1}{2}(\hat{N}_i - 1). && (68)
\end{aligned}
$$

$$
[S_+^i, S_-^i] = 2S_0^i, \quad [S_0^i, S_\pm^i] = \pm S_\pm^i. \tag{69}
$$

$$
\begin{aligned}
\left[S_-^i, c_i^\dagger\right] &= c_{\bar{i}}, && (70)\\
\left[S_+^i, c_{\bar{i}}\right] &= c_i^\dagger, && (71)\\
\left[S_0^i, c_i^\dagger\right] &= \frac{1}{2}c_i^\dagger, && (72)\\
\left[S_0^i, c_{\bar{i}}\right] &= -\frac{1}{2}c_{\bar{i}}. && (73)
\end{aligned}
$$

$$
\boldsymbol{c}_i^\dagger = \begin{pmatrix} c_i^\dagger \\ c_{\bar{i}} \end{pmatrix} \tag{74}
$$

準粒子 (quasiparticle) 概念の導入 (Bogoliubov 変換)

$$
\begin{aligned}
a_i^\dagger &= U c_i^\dagger U = u_i c_i^\dagger - v_i c_{\bar{i}}, && (75)\\
a_{\bar{i}} &= U c_{\bar{i}} U = u_i c_{\bar{i}} + v_i c_i^\dagger. && (76)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{pmatrix} a_i^\dagger \\ a_{\bar{i}} \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} c_i^\dagger \\ c_{\bar{i}} \end{pmatrix} U^\dagger = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta_i}{2} & -\sin\frac{\theta_i}{2} \\ \sin\frac{\theta_i}{2} & \cos\frac{\theta_i}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_i^\dagger \\ c_{\bar{i}} \end{pmatrix} \tag{77}
$$

準スピン空間での回転とみなせる。

BCS 状態は準粒子の真空

$$a_i|\phi_{\mathrm{BCS}}\rangle = a_{\bar{i}}|\phi_{\mathrm{BCS}}\rangle = 0 \tag{78}$$

$\theta_i$ の値は拘束条件付き変分原理によって決める

$$\delta\langle\phi_{\mathrm{BCS}}|H-\lambda\hat{N}|\phi_{\mathrm{BCS}}\rangle = 0, \qquad \hat{N} = \sum_i \hat{N}_i \tag{79}$$

すなわち

$$\begin{aligned}
\langle\phi_{\mathrm{BCS}}|\ [a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger,\ H-\lambda\hat{N}]\ |\phi_{\mathrm{BCS}}\rangle &= 0, &(80)\\
\langle\phi_{\mathrm{BCS}}|\ [a_{\bar{i}} a_i,\ H-\lambda\hat{N}]\ |\phi_{\mathrm{BCS}}\rangle &= 0. &(81)
\end{aligned}$$

対ハミルトニアンと対ポテンシャル

$$\begin{aligned}
H^{'} &= H-\lambda\hat{N} &(82)\\
&= \sum_i (e_i-\lambda)(c_i^\dagger c_i + c_{\bar{i}}^\dagger c_{\bar{i}}) - G\sum_{i,j} A_i^\dagger A_j &(83)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{\mathrm{BCS}}^{'} &= \sum_i (e_i-\lambda)(c_i^\dagger c_i + c_{\bar{i}}^\dagger c_{\bar{i}}) - \Delta\sum_i (c_i^\dagger c_{\bar{i}}^\dagger + c_{\bar{i}} c_i) &(84)\\
&\Rightarrow \sum_i E_i (a_i^\dagger a_i + a_{\bar{i}}^\dagger a_{\bar{i}}) &(85)
\end{aligned}$$

エネルギーギャップと粒子数

$$\begin{aligned}
\Delta &= G\langle\phi_{\mathrm{BCS}}|\sum_i A_i|\phi_{\mathrm{BCS}}\rangle &(86)\\
&= G\sum_i u_i v_i, &(87)\\
N &= \langle\phi_{\mathrm{BCS}}|\hat{N}|\phi_{\mathrm{BCS}}\rangle &(88)\\
&= 2\sum_i v_i^2 &(89)
\end{aligned}$$

準粒子に対する運動方程式

$$\begin{aligned}
\left[H_{\mathrm{BCS}}^{'}, a_i^\dagger\right] &= E_i a_i^\dagger, &(90)\\
\left[H_{\mathrm{BCS}}^{'}, a_{\bar{i}}\right] &= -E_i a_{\bar{i}} &(91)
\end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} e_i-\lambda & -\Delta \\ -\Delta & -(e_i-\lambda) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix} = E_i \begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix} \tag{92}$$

ギャップ方程式

$$\frac{2}{G} = \sum_i \frac{1}{E_i} \tag{93}$$

準粒子エネルギー

$$E_i = \sqrt{(e_i-\lambda)^2 + \Delta^2} \tag{94}$$

位相の自由度

$$U(\Lambda) = e^{-i\Lambda\hat{n}}, \qquad \hat{n} = \hat{N}/2 \tag{95}$$

$$\begin{aligned} |\phi(\Lambda)_{\rm BCS}\rangle &= U(\Lambda)|\phi_{\rm BCS}\rangle & (96)\\ &= \prod_i (u_i + e^{-i\Lambda} v_i A_i^\dagger)|0\rangle & (97)\\ &= \prod_i (u_i + v_i A_i^\dagger(\Lambda))|0\rangle & (98) \end{aligned}$$

$$A_i^\dagger(\Lambda) = e^{-i\Lambda} A_i^\dagger \tag{99}$$

粒子数射影

$$\int_0^{2\pi} e^{in\Lambda}|\phi(\Lambda)_{\rm BCS}\rangle d\Lambda \propto (A^\dagger)^n|0\rangle, \quad A^\dagger = \sum_i \frac{v_i}{u_i} A_i^\dagger \tag{100}$$

## 4. スピン・コヒーレント状態

$$|\xi\rangle = e^{\xi\hat{J}_+ - \xi^*\hat{J}_-}|J, -J\rangle, \tag{101}$$

$$\hat{J}_-|J, -J\rangle = 0. \tag{102}$$

$\xi = \frac{\theta}{2}e^{i\varphi}$ と書く。$\varphi = 0$ のとき

$$\begin{aligned} |\xi\rangle &= e^{\frac{\theta}{2}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-)}|J, -J\rangle & (103)\\ &= e^{\tan\frac{\theta}{2}\hat{J}_+} e^{-2\log|\cos\frac{\theta}{2}|\hat{J}_0} e^{-\tan\frac{\theta}{2}\hat{J}_-}|J, -J\rangle \qquad (\theta \neq \pi) & (104)\\ &= e^{2J\log|\cos\frac{\theta}{2}|} e^{\tan\frac{\theta}{2}\hat{J}_+}|J, -J\rangle & (105)\\ &= (cos\frac{\theta}{2})^{2J} e^{\tan\frac{\theta}{2}\hat{J}_+}|J, -J\rangle & (106)\\ &= (1 + |z|^2)^{-J} e^{z\hat{J}_+}|J, -J\rangle. & (107) \end{aligned}$$

ここで $z = \tan\frac{\theta}{2}$.

2 次元調和振動子は

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ &= B_y^\dagger B_x, & (108)\\ \hat{J}_- &= B_x^\dagger B_y, & (109)\\ \hat{J}_0 &= \frac{1}{2}(B_y^\dagger B_y - B_x^\dagger B_x) & (110) \end{aligned}$$

により、スピン・コヒーレント状態を使って表現できる。

## 5. 時間依存 Hartree-Fock-Bogoliubov 理論 (TDHFB)

時間依存 HFB 状態 (一般化されたコヒーレント状態)

$$|\phi(t)\rangle = e^{i\hat{G}(t)}|\phi(t = 0)\rangle \tag{111}$$

$$i\hat{G}(t) = \sum_{(ij)} (g_{ij}(t) a_i^\dagger a_j^\dagger - g_{ij}^*(t) a_j a_i) \tag{112}$$

$$|\phi(t=0)\rangle = |\phi_0\rangle \tag{113}$$

$$a_i|\phi_0\rangle = 0 \tag{114}$$

対演算子の組 $(a_i^\dagger a_j^\dagger,\ a_j a_i,\ a_i^\dagger a_j)$ はリー代数の無限小生成演算子と見なせる。

時刻 $t$ での準粒子

$$\begin{aligned} a_i(t) &= e^{i\hat{G}(t)} a_i e^{-i\hat{G}(t)} && (115)\\ &= a_i + [i\hat{G}, a_i] + \frac{1}{2}[i\hat{G}, [i\hat{G}, a_i]] + \frac{1}{6}[i\hat{G}, [i\hat{G}, [i\hat{G}, a_i]]] + \cdots && (116)\\ &= \sum_j (U_{ji} a_j + V_{ji} a_j^j). && (117) \end{aligned}$$

$$U^T = \cos\sqrt{G^\dagger G}, \qquad V^T = G^\dagger \frac{\sin\sqrt{GG^\dagger}}{\sqrt{GG^\dagger}} \tag{118}$$

$G$ は $g_{ij}$ からなる行列

時刻 $t$ での TDHFB 状態 $|\phi(t)\rangle$ は時刻 $t$ での準粒子 $a_i^\dagger(t)$ に対する真空になっている

$$a_i(t)|\phi(t)\rangle = 0 \tag{119}$$

未知の一体演算子 $\hat{G}(t)$ は時間依存変分原理によって決める

$$\delta\langle\phi(t)|i\frac{\partial}{\partial t} - H|\phi(t)\rangle = 0. \tag{120}$$

ここで、$\hat{G}(t)$ が集団座標と集団運動量 $(q(t),\, p(t))$ によって決定されていると仮定すると

$$\hat{G}(t) = \hat{G}(q(t), p(t)) \tag{121}$$

または、時間に依存する複素変数 $(\eta^*(t), \eta(t))$ を用いて

$$\hat{G}(t) = \hat{G}(\eta^*(t), \eta(t)) \tag{122}$$

と書ける。両者の関係は、例えば $q(t) = \frac{1}{2}(\eta^*(t) + \eta(t)),\ \ p(t) = \frac{i}{2}(\eta^*(t) - \eta(t))$.
時間依存変分原理は

$$\delta\langle\phi(q,p)|i\frac{\partial}{\partial t} - H|\phi(q,p)\rangle = 0, \tag{123}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \dot{q}\frac{\partial}{\partial q} + \dot{p}\frac{\partial}{\partial p} \tag{124}$$

または

$$\delta\langle\phi(\eta^*,\eta)|i\frac{\partial}{\partial t} - H|\phi(\eta^*,\eta)\rangle = 0. \tag{125}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \dot{\eta}\frac{\partial}{\partial \eta} + \dot{\eta^*}\frac{\partial}{\partial \eta^*} \tag{126}$$

## 6. Quasiparticle RPA

一般に

$$\begin{aligned} e^{-i\hat{G}}He^{i\hat{G}} &= H + [H, i\hat{G}] + \frac{1}{2}[[H, i\hat{G}], i\hat{G}] + ... & (127)\\ e^{-i\hat{G}}\frac{\partial}{\partial t}e^{i\hat{G}} &= i\frac{\partial \hat{G}}{\partial t} + \frac{1}{2}[i\frac{\partial \hat{G}}{\partial t}, i\hat{G}] + ... & (128)\\ & & (129) \end{aligned}$$

TDHFB の小振幅近似が Quasiparticle RPA (QRPA)
展開の１次項のみを考慮すると

$$\begin{aligned} |\phi(t)\rangle &= e^{i\hat{G}(t)}|\phi_0\rangle & (130)\\ &\approx (1 + i\hat{G}(t))|\phi_0\rangle & (131) \end{aligned}$$

$$\delta\langle\phi_0|[H, i\hat{G}] + \frac{\partial \hat{G}}{\partial t}|\phi_0\rangle = 0 \tag{132}$$

励起モードの生成・消滅演算子 $(\Gamma, \Gamma^\dagger)$ を導入する

$$i\hat{G}(t) = \eta(t)\Gamma - \eta^*(t)\Gamma^\dagger \tag{133}$$

$$\eta(t) = \eta e^{-i\omega t} \tag{134}$$

$$\begin{aligned} \Gamma^\dagger &= \sum_{(ij)}(\psi(ij)a_i^\dagger a_j^\dagger - \varphi(ij)a_j a_i), & (135)\\ \Gamma &= \sum_{(ij)}(\varphi^*(ij)a_i^\dagger a_j^\dagger - \psi^*(ij)a_j a_i) & (136) \end{aligned}$$

とおくと

$$\begin{aligned} \delta\langle\phi_0|[H, \Gamma^\dagger] - \omega\Gamma^\dagger|\phi_0\rangle &= 0, & (137)\\ \delta\langle\phi_0|[H, \Gamma] + \omega\Gamma|\phi_0\rangle &= 0. & (138) \end{aligned}$$

こうして、馴染みの QRPA 方程式が得られる

$$\begin{aligned} [\ H,\ \Gamma^\dagger\ ] &= \omega\Gamma^\dagger, & (139)\\ [\ H,\ \Gamma\ ] &= -\omega\Gamma. & (140) \end{aligned}$$

生成・消滅演算子の代わりに集団運動量と集団座標による表示を用いて QRPA を定式化しておけば、Anderson-Nambu-Goldstone モードの取り扱いや固有モードの振動数が複素数になった場合も取り扱うことが出来て便利である

$$\hat{G}(t) = p(t)\hat{Q} - q(t)\hat{P} \tag{141}$$

$$\begin{aligned} [\ \hat{H},\ \hat{Q}\ ] &= -i\hat{P}/M, \quad (142) \\ [\ \hat{H},\ \hat{P}\ ] &= iC\hat{Q}. \quad (143) \end{aligned}$$

$$\omega^2 = C/M \quad (144)$$

$$\begin{aligned} \hat{Q} &= \sum_{(ij)} q(ij)(a_i^\dagger a_j^\dagger + a_j a_i), \quad (145) \\ \hat{P} &= i\sum_{(ij)} p(ij)(a_i^\dagger a_j^\dagger - a_j a_i). \quad (146) \end{aligned}$$

この近似で、TDHFB 状態はボソン・コヒーレント状態と同様に書ける

$$|\phi(t)\rangle = |\phi(q,p)\rangle = e^{i(p\hat{Q}-q\hat{P})}|\phi_0\rangle \quad (147)$$

ゼロ・エネルギー ANG モード:
$\hbar\omega_n = 0$ モードに n=0 と添字をつけて、他の $\hbar\omega_n \neq 0$ モードと区別する

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_n (\frac{\hat{P}_n^2}{2M_n} + \frac{1}{2}M_n\omega_n^2\hat{Q}_n^2) \quad (148) \\ &= \frac{\hat{P}_0^2}{2M_0} + \sum_{n\neq 0}(\frac{\hat{P}_n^2}{2M_n} + \frac{1}{2}M_n\omega_n^2\hat{Q}_n^2) \quad (149) \end{aligned}$$

$$[\ \hat{H},\ \hat{P}_0\ ] = 0 \quad (150)$$

QRPA は平均場が破った対称性を回復する！

粒子数 (ゲージ）空間での回転 (pairing rotation)

$$\begin{aligned} [\ \hat{H},\ \hat{\Lambda}\ ] &= -i\hat{N}/M, \quad (151) \\ [\ \hat{H},\ \hat{N}\ ] &= 0. \quad (152) \end{aligned}$$

$x$ 軸周りの一様な回転運動

$$\begin{aligned} [\ \hat{H},\ \hat{\Theta}\ ] &= -i\hat{J}_x/\mathcal{J}, \quad (153) \\ [\ \hat{H},\ \hat{J}_x\ ] &= 0. \quad (154) \end{aligned}$$

ゼロ・エネルギーになるのは曲率がゼロになるためで、集団質量（慣性質量）と運動エネルギーは有限の値を持つ。

## 7. QRPA のアイディアの大振幅への拡張

TDHFB 状態の時間変化が集団変数によって決められると仮定し

$$|\phi(t)\rangle \Rightarrow |\phi(q,p)\rangle = e^{i\hat{G}(q,p)}|\phi_0\rangle \quad (155)$$

または

$$|\phi(t)\rangle \Rightarrow |\phi(\eta,\eta^*)\rangle = e^{i\hat{G}(\eta,\eta^*)}|\phi_0\rangle, \tag{156}$$

$$\eta = (q+ip)/\sqrt{2}, \qquad \eta^* = (q-ip)/\sqrt{2} \tag{157}$$

と書く。

通常のＳＣＣ法：
$\hat{G}$ を $(\eta,\eta^*)$ に関して冪展開する

$$\hat{G}(\eta,\eta^*) = \sum_{mn} \hat{G}_{mn}(\eta^*)^m \eta^n \tag{158}$$

展開係数 $\hat{G}_{mn}$ は時間依存変分原理

$$\delta\langle\phi(\eta,\eta^*)|i\frac{\partial}{\partial t} - H|\phi(\eta,\eta^*)\rangle = 0. \tag{159}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \dot{\eta}\frac{\partial}{\partial \eta} + \dot{\eta}^*\frac{\partial}{\partial \eta^*} \tag{160}$$

により逐次的に決定される。

Adiabatic SCC 法　（ASCC）:
TDHFB 状態が次のように書けると仮定する

$$|\phi(q,p)\rangle = e^{ip\hat{Q}(q)}|\phi(q)\rangle \tag{161}$$

無限小変位演算子 $\hat{P}(q)$ を導入する

$$|\phi(q+\delta q)\rangle = (1 - i\delta q\hat{P}(q))|\phi(q)\rangle \tag{162}$$

集団運動量 q に関して冪展開し 2 次の項まで考慮する (断熱近似)
時間依存変分原理

$$\delta\langle\phi(q,p)|i\frac{\partial}{\partial t} - H|\phi(q,p)\rangle = 0. \tag{163}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \dot{q}\frac{\partial}{\partial q} + \dot{p}\frac{\partial}{\partial p} \tag{164}$$

により $(\hat{Q}(q), \hat{P}(q))$ を微視的かつ自己無撞着に決定する方程式が導かれる。

## 8. 座標表示 TDHFB 方程式

密度依存 $\delta$ 型 Pairing 相互作用

$$v_{\mathrm{pair}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = -v_{\mathrm{pair}}(\rho(\boldsymbol{r}))\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'), \tag{165}$$

$$v_{\mathrm{pair}}(\rho(\boldsymbol{r})) = -v_0(1-\rho(\boldsymbol{r})/\rho_0) \tag{166}$$

HFB 平均場ハミルトニアン

$$H = \int d\boldsymbol{r}\psi^\dagger(\boldsymbol{r})\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*(\boldsymbol{r})}\nabla^2 + V_{\rm HF}(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r}) \tag{167}$$

$$-\int d\boldsymbol{r}\Delta(\boldsymbol{r})\left(\psi^\dagger_\uparrow(\boldsymbol{r})\psi^\dagger_\downarrow(\boldsymbol{r}) + \psi_\downarrow(\boldsymbol{r})\psi_\uparrow(\boldsymbol{r})\right) \tag{168}$$

対ポテンシャル（対凝縮の創る平均場）

$$\Delta(\boldsymbol{r}) = v_{\rm pair}(\rho(\boldsymbol{r}))\langle\phi_0|\psi^\dagger_\uparrow(\boldsymbol{r})\psi^\dagger_\downarrow(\boldsymbol{r})|\phi_0\rangle \tag{169}$$

対場の時間変化（対凝縮場の集団励起モード）

$$\Delta(\boldsymbol{r},t) = v_{\rm pair,t}(\rho(\boldsymbol{r},t))\langle\phi_0(t)|\psi^\dagger_\uparrow(\boldsymbol{r},t)\psi^\dagger_\downarrow(\boldsymbol{r},t)|\phi_0(t)\rangle \tag{170}$$

$$= |\Delta(\boldsymbol{r},t)|e^{i\chi(\boldsymbol{r},t)} \tag{171}$$

準粒子の生成・消滅演算子

$$a^\dagger_i = \int d\boldsymbol{r}\left(u_i(\boldsymbol{r})\psi^\dagger(\boldsymbol{r}) + v_i(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\right), \tag{172}$$

$$a_i = \int d\boldsymbol{r}\left(u_i(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) + v_i(\boldsymbol{r})\psi^\dagger(\boldsymbol{r})\right). \tag{173}$$

(記号を簡単にするためにスピン座標を省略. 以下同様）

準粒子の真空 (HFB 基底状態）

$$a_i|\phi_0\rangle = 0 \tag{174}$$

座標表示 HFB 方程式

$$\begin{pmatrix} \hat{T} + V_{\rm HF}(\boldsymbol{r}) - \lambda & \Delta(\boldsymbol{r}) \\ \Delta(\boldsymbol{r}) & -\hat{T} - V_{\rm HF}(\boldsymbol{r}) + \lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_i(\boldsymbol{r}) \\ v_i(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix} = E_i\begin{pmatrix} u_i(\boldsymbol{r}) \\ v_i(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix} \tag{175}$$

エネルギーギャップ $\Delta(\boldsymbol{r})$ が空間座標 $\boldsymbol{r}$ に依存しない、つまり $\Delta(\boldsymbol{r}) = \Delta$ の場合

$$u_i(\boldsymbol{r}) = u_i\varphi_i^{\rm HF}(\boldsymbol{r}), \tag{176}$$

$$v_i(\boldsymbol{r}) = v_i\varphi_i^{\rm HF}(\boldsymbol{r}), \tag{177}$$

$$\left(\hat{T} + V_{\rm HF}(\boldsymbol{r})\right)\varphi_i^{\rm HF}(\boldsymbol{r}) = e_i\varphi_i^{\rm HF}(\boldsymbol{r}) \tag{178}$$

密度分布

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \sum_{e_i<0} v_i^2|\varphi_i^{\rm HF}(\boldsymbol{r})|^2 + \int_{e>0} deg(e)|v(e)\varphi_i^{\rm HF}(e,\boldsymbol{r})|^2 \tag{179}$$

$$\varphi_i^{\rm HF}(\boldsymbol{r}) \rightarrow e^{-\alpha_i r}/r \quad (e_i < 0), \tag{180}$$

$$\varphi_i^{\rm HF}(\boldsymbol{r}) \rightarrow \sin(k_i r + \delta_i)/r \quad (e_i > 0), \tag{181}$$

$$\alpha_i = \sqrt{-2me_i/\hbar^2}. \tag{182}$$

無限遠 $r \to \infty$ で $V_{\mathrm{HF}}(\boldsymbol{r}) \to 0, \Delta(\boldsymbol{r}) \to 0$ なので

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u_i(r) &= (E_i+\lambda)u_i(r), && (183)\\ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 v_i(r) &= -(E_i-\lambda)v_i(r). && (184)\end{aligned}$$

したがって、 $E_i \geq |\lambda|$ に対して

$$\begin{aligned} u_i(\boldsymbol{r}) &\to \sin(\beta_i r+\delta_i)/r, && (185)\\ v_i(\boldsymbol{r}) &\to e^{-\gamma_i r}/r, && (186)\\ \beta_i &= \sqrt{2m(E_i+\lambda)/\hbar^2}, && (187)\\ \gamma_i &= \sqrt{2m(E_i-\lambda)/\hbar^2}. && (188)\end{aligned}$$

遠方での密度とペアー密度の振舞い

$$\begin{aligned} \rho(\boldsymbol{r}) &= \sum_{E_i>0}|v_i(\boldsymbol{r})|^2 \to e^{-2\gamma_{\min}r}/r^2, && (189)\\ \tilde{\rho}(\boldsymbol{r}) &= \sum_{E_i>0}u_i(\boldsymbol{r})v_i(\boldsymbol{r}) \to e^{-\gamma_{\min}r}/r^2. && (190)\end{aligned}$$

基底関数 $\varphi_n(\boldsymbol{r})$ による展開

$$\begin{aligned} u_i(\boldsymbol{r}) &= \sum_n u_{in}\varphi_n(\boldsymbol{r}), && (191)\\ v_i(\boldsymbol{r}) &= \sum_n v_{in}\varphi_n(\boldsymbol{r}), && (192)\end{aligned}$$

密度汎関数

$$E = \int d\boldsymbol{r}\mathsf{H}(\rho(\mathsf{r}), \tilde{\rho}(\mathsf{r}), \tau(\mathsf{r})) \qquad (193)$$

$$\begin{aligned} \rho(\boldsymbol{r}) &= \langle\phi_0|\psi^\dagger(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})|\phi_0\rangle = \sum_i |v_i(\boldsymbol{r})|^2, && (194)\\ \tilde{\rho}(\boldsymbol{r}) &= \langle\phi_0|\psi^\dagger_\uparrow(\boldsymbol{r})\psi^\dagger_\downarrow(\boldsymbol{r})|\phi_0\rangle = \sum_i u_i(\boldsymbol{r})v_i(\boldsymbol{r}), && (195)\\ \tau(\boldsymbol{r}) &= \sum_i |\nabla v_i(\boldsymbol{r})|^2. && (196)\end{aligned}$$

時間依存 HFB 方程式 (TDHFB)

$$\begin{pmatrix} \hat{T}+V_{\mathrm{HF}}(\boldsymbol{r},t)-\lambda(t) & \Delta(\boldsymbol{r},t) \\ \Delta(\boldsymbol{r},t) & -\hat{T}-V_{\mathrm{HF}}(\boldsymbol{r},t)+\lambda(t)\end{pmatrix}\begin{pmatrix} u(\boldsymbol{r},t)\\ v(\boldsymbol{r},t)\end{pmatrix} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} u(\boldsymbol{r},t)\\ v(\boldsymbol{r},t)\end{pmatrix} \qquad (197)$$