

## 有限量子多体系の集団励起-代数的視点から-

version 06.3

## ◎プラン

## A 代数的準備

- A1) 数学的概念
- A2) 種々の行列群
- A3) 行列（演算子）の指数関数公式

## G 一般コヒーレント状態とその上の力学

- G1) ボソン・コヒーレント状態
- G2) スピン・コヒーレント状態
- G3) フェルミ系の一般コヒーレント状態
- G4) 一般化
- G5) いくつかの応用

## P 対相関と自由度の分離

- P1) フェルミ系の対自由度と内部自由度
- P2) 量子ボゴリューボフ変換
- P3) ボース・フェルミ系への拡張
- P4) ハバード模型への応用

## C 正準変換による集団自由度の扱い

- 1) 正準変換と自由度の分離
- 2) 重心運動への適用

## A. 代数的準備

以下で必要になるいくつかの数学的用語および公式を挙げる。<sup>1</sup>

### A.1 数学的概念

#### 1. 群、リー群

$G$  の二つの元  $f, g$  に対してその「積」  $fg$  が定義され、 $G$  の元となり、次の性質をもつ。

- 1) 結合律:  $(fg)h = f(gh) \forall f, g, h \in G$
- 2) 単位元: 全ての元  $g \in G$  に対し、 $ge = eg = g$  なる元  $e \in G$  がある。
- 3) 逆元: 各  $g \in G$  に対し、 $gg^{-1} = g^{-1}g = e$  なる元  $g^{-1} \in G$  がある。

リー群は、群であると同時に、多様体の構造をもち、群の演算が微分可能であるもの。

例: 回転群  $SO(3)$ : 群  $G$  の要素  $g \in G$  は回転軸の方向  $\vec{n}$  と回転角  $\varphi$  (または三つのオイラー角  $\psi, \theta, \varphi$ ) によって指定され、二つの回転  $g, g'$  を続けて行なったものは、別の一つの回転  $g'' = g'g$  であらわされる。

#### 2. ベクトル空間

ベクトル空間  $V$ : 和およびスカラー積の二つの演算をもつ。  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in V, a \in \mathbf{K}$  ならば、 $\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2 \in V, a\mathbf{x} \in V$  となる。(  $\mathbf{K}$  は実数体  $\mathbf{R}$  または複素数体  $\mathbf{C}$  )。  $V$  の次元を  $n$  とするとき、  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n$  を  $V$  の基底とすると、任意のベクトル  $\mathbf{x} \in V$  は

$$\mathbf{x} = x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + \dots + x_n\mathbf{e}_n \quad (\text{A.1})$$

のように一通りにあらわされる。

以下の行列群での扱いでは、  $\mathbf{x} \in V$  をしばしば  $n$  成分の数ベクトル  $\mathbf{x} \in \mathbf{K}^n$  と同一視する:

$$\mathbf{x} = (\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n) \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \leftrightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = {}^t(x_1, \dots, x_n) \in \mathbf{K} \quad (\text{A.2})$$

ベクトル空間  $V$  上の正則一次変換全体  $GL(V)$  は群をなす。  $n$  成分数ベクトル空間が  $\mathbf{R}$  (または  $\mathbf{C}$ ) 上で定義されていれば、この群は、  $n$  次の正則行列全体のなす「一般線形群」  $GL(n, \mathbf{R})$  (または、  $GL(n, \mathbf{C})$ ) となる。

#### 3. リー代数 (リー環)

リー代数  $L$  は  $\mathbf{K}$  上の有限次元ベクトル空間で、その元  $X, Y$  に次の性質を持つ「交換子積」が定義されているもの。

<sup>1</sup> [文献]

- 山内恭彦、杉浦光夫「連続群論入門」(培風館,1960)
- 松島与三「多様体入門」(裳華房,1965)
- 小林俊行、大島利雄「リー群と表現論」(岩波書店,2005)
- A.O.Barut & R.Rączka, 'Theory of Group Representations and Applications' (PWN, 1977)
- S.Helgason, 'Differential Geometry, Lie Groups, and Symmetric Spaces' (Academic Press, 1978)

- $[\alpha X + \beta Y, Z] = \alpha[X, Z] + \beta[Y, Z] \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbf{K}$
- $[X, Y] = -[Y, X] \quad \forall X, Y \in L$
- $[X, [Y, Z]] + [Y, [Z, X]] + [Z, [X, Y]] = 0 \quad \forall X, Y, Z \in L$

リー群の元  $g \in G$  は、リー代数の元  $X \in L$  を用いて  $g = \exp(tX)$  ( $t \in \mathbf{K}$ ) とあらわされる。

例：回転群の場合は、角運動量演算子  $iL_x, iL_y, iL_z$  が  $SO(3)$  のリー代数を構成し、群の元は

$$g = (\vec{n}, \phi) = \exp(i\phi \vec{n} \cdot \vec{L}) \quad (\text{A.3})$$

二つの回転の積は：

$$g'g = \exp\{i\phi' \vec{n}' \cdot \vec{L}\} \exp\{i\phi \vec{n} \cdot \vec{L}\} = \exp\{i\phi'' \vec{n}'' \cdot \vec{L}\} = g'' \quad (\text{A.4})$$

#### 4. 群の表現

群  $G$  から群  $GL(V)$  の中への準同型写像  $\rho$  を  $G$  の  $V$  上での表現とよぶ。

$$\rho(g'g) = \rho(g)\rho(g') \quad \text{但し } g, g' \in G, \quad \rho(g), \rho(g') \in GL(V) \quad (\text{A.5})$$

以下では専ら、 $V$  として数ベクトル空間を考えるので、表現は行列表現を意味する。 $V$  の部分空間  $U$  で  $\rho(G)$  で不変なもの ( $\rho(g)U \subset U, \quad \forall g \in G$  となるもの) が、 $U = 0, V$  以外にないとき、この表現は既約であるという。

例：回転群  $SO(3)$  では、既約表現は整数  $J = 0, 1, 2, \dots$  で指定され、各既約表現の次数は  $2J+1$  となる。従って、それぞれの表現に対して、 $SO(3)$  の元およびそのリー代数の元は  $(2J+1) \times (2J+1)$  行列であらわされる。回転行列  $D_{MK}^J(\vec{n}, \phi)$  は、 $g = (\vec{n}, \phi) \in SO(3)$  の既約表現  $J$  の行列  $D^J(g)$  の  $MK$  成分。

#### 5. 変換群・等方部分群

群  $G$  の元  $g$  がある集合  $X$  の要素  $x$  に作用する場合、次の条件を満たすとき、 $G$  を「 $X$  の変換群」とよぶ：

- 1)  $g(hx) = (gh)x \quad (g, h \in G, x \in X)$
- 2)  $G$  の単位元  $e$  に対し、 $ex = x \quad (x \in X)$

ある  $x \in X$  に対し、 $gx = x$  を満たす  $g \in G$  の集合  $G_{(x)}$  は  $G$  の部分群となる。これを ( $G$  における)  $x$  の「等方部分群 (isotropy subgroup, 固定部分群)」とよぶ。

例： $x$  が 3次元の  $z$  方向のベクトルであるとき、回転群  $SO(3)$  の元のうち、 $z$  軸回りの回転の集合  $H$  は  $x$  の等方部分群 ( $\simeq SO(2)$ ) となる。

#### 6. 等質空間

集合  $X$  の変換群  $G$  について、任意の  $x, y \in X$  に対して  $y = gx$  となる  $g \in G$  があるとき、「 $G$  は  $X$  に推移的に作用する」。このとき  $X$  を  $G$  の「等質空間 (homogeneous space)」とよぶ。

各  $x$  に対し、集合  $Gx = \{gx | g \in G\}$  を「( $x$  を通る)  $G$  軌道」とよぶ。異なる軌道は交わらないため、 $X$  を異なる  $G$  軌道の和として軌道分解することができる。

$X$  が  $G$  の等質空間であるとき、 $X$  の任意の一点  $o$  を固定し、その等方部分群を  $G_{(o)}$  とする。このとき、 $X$  の要素と  $G$  の  $G_{(o)}$  による商空間  $G/G_{(o)} = \{gG_{(o)} | g \in G\}$  が 1 対 1 に対応する。

証明： $x = go$  とするとき、定義より  $g \in gG_{(o)}$ 。別の  $h \in G$  に対しても  $x = ho$  となれば、 $o = g^{-1}ho$  故、 $g^{-1}h \in G_{(o)}$ 。故に  $h \in gG_{(o)}$ 。逆も成立。

例：前例の回転群では、商空間  $G/H \simeq SO(3)/SO(2)$  は等質空間となり、これは球面  $S^2$  に同型。

## 7. 行列群の不変測度

群のパラメタ上の積分が（左）不変であるとは：

$$\int_G f(g_0g) d\mu(g) = \int_G f(g) d\mu(g) \quad (\forall g_0 \in G) \quad (\text{A.6})$$

が成立すること。とくに（局所）コンパクト群ではこの不変測度を（左）ハール測度とよぶ。

$n \times n$  行列  $g$  の群の不変測度は、一次微分形式  $dg_{ij}$  の行列  $dg$  を用いて行列  $V(g) = g^{-1}dg$  が不変であることを利用して導かれる。実際、 $x \in G$  を固定したとき、 $V(xg) = (xg)^{-1}d(xg) = g^{-1}x^{-1}xdg = V(g)$  となる。そこで、群  $G$  の次元（独立なパラメタの数）が  $N$  であれば、任意の独立な  $N$  個の成分  $V(g)_{ij}$  を選んでその外積をつくれば、これは不変な積分測度を与える。

## A.2 種々の行列群

体  $\mathbf{K}(= \mathbf{R}, \mathbf{C})$  上の全ての  $n \times n$  行列の集合  $M(n, \mathbf{K})$  の部分集合で、群となるものの例：

- $GL(n, \mathbf{K})$  : 一般線型群。逆行列をもつ  $n$  に正方行列全体。  
 $\dim GL(n, \mathbf{C}) = 2n^2$ 。

$$GL(n, \mathbf{K}) = \{g \in M(n, \mathbf{K}) \mid \det g \neq 0\} \quad (\text{A.7})$$

- $SL(n, \mathbf{K})$  : 特殊線型群。行列式が 1 の行列全体。  
 $\dim SL(n, \mathbf{C}) = 2n^2 - 2$ 。

$$SL(n, \mathbf{K}) = \{A \in GL(n, \mathbf{K}) \mid \det A = 1\} \quad (\text{A.8})$$

- $O(n)$  : (実) 直交群。実直交行列全体。

$$O(n) = \{A \in GL(n, \mathbf{R}) \mid A^T = A^{-1}\} \quad (\text{A.9})$$

$SO(n)$  : 回転群 (特殊直交群)。

$$SO(n) = O(n) \cap SL(n, \mathbf{R}) \quad (\text{A.10})$$

- $U(n)$  : ユニタリ群。  $\dim U(n) = n^2$ 。

$$U(n) = \{A \in GL(n, \mathbf{C}) \mid A^\dagger = A^{-1}\} \quad (\text{A.11})$$

$SU(n)$  : 特殊ユニタリ群。次元は  $n^2 - 1$ 。

$$SU(n) = U(n) \cap SL(n, \mathbf{C}) \quad (\text{A.12})$$

- $Sp(n, \mathbf{K})$  : 実 ( $\mathbf{K} = \mathbf{R}$ )/複素 ( $\mathbf{K} = \mathbf{C}$ ) シンプレクティック群。

$$Sp(n, \mathbf{K}) = \{g \in M(2n, \mathbf{K}) \mid g^T J g = J\} \quad (\text{A.13})$$

ただし、 $J$  は  $2n \times 2n$  行列  $I_n$  を  $n$  次の単位行列として、

$$J = \begin{pmatrix} O & -I_n \\ I_n & O \end{pmatrix} \quad (\text{A.14})$$

$Sp(n)$  : (ユニタリ) シンプレクティック群。

$$Sp(n) \simeq Sp(n, \mathbf{C}) \cap U(2n) \quad (\text{A.15})$$

### A.3 演算子の指数関数公式

演算子（行列）の指数関数に関連した公式。<sup>2</sup>

#### 1. 展開公式

$A, B$  を一般に非可換な二つの演算子とすると、次の公式が成立。

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \quad (\text{A.16})$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \underbrace{[\hat{A}, [\hat{A}, \dots [\hat{A}, \hat{B}] \dots]]}_n \quad (\text{A.17})$$

[証明] :  $\hat{A} \rightarrow x\hat{A}$  のようにパラメタ  $x$  をかけた形に書き、両辺を  $x$  で何回か微分して  $x=0$  と置けばよい。

#### 2. パラメタ積分に関する公式

$\beta$  を適当なパラメタとし、演算子  $\hat{H}$  が別のパラメタ  $\lambda$  の関数であるとき、

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} e^{-\beta \hat{H}} = - \int_0^\beta dx e^{-(\beta-x)\hat{H}} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} e^{-x\hat{H}} \quad (\text{A.18})$$

[証明] : 左辺及び右辺をそれぞれ  $\beta$  の関数として  $F(\beta), G(\beta)$  とおく。 $\beta=0$  で  $F(0) = G(0) = 0$  を満たす。両辺を  $\beta$  で微分すると、左辺は

$$\frac{\partial F(\beta)}{\partial \beta} = - \frac{\partial H}{\partial \lambda} e^{-\beta H} - HF(\beta) \quad (\text{A.19})$$

であり、右辺は上式で  $F$  を  $G$  で置き換えたものになる。同じ1階の微分方程式を満たし、初期条件が一致するので、 $F(\beta) = G(\beta)$  となる。

この公式の特別の場合が、Feynman の公式 :

$$\left[ \frac{d}{d\lambda} e^{\hat{A} + \lambda \hat{B}} \right]_{\lambda=0} = \int_0^1 dx e^{(1-x)\hat{A}} \hat{B} e^{x\hat{A}} \quad (\text{A.20})$$

また、Kubo の公式 :

$$[\hat{A}, e^{-\beta \hat{H}}] = - \int_0^\beta dx e^{-(\beta-x)\hat{H}} [\hat{A}, \hat{H}] e^{-x\hat{H}} \quad (\text{A.21})$$

も同様に証明できる。

---

2

- W.Magnus, Comm.Pure Appl.Math.7 (1954)649
- G.H.Weiss & A.A.Maradudin, JMP 3 (1962)771
- R.M.Wilcox, JMP 8(1967)962
- M.Suzuki, CMP 51(1976)183 及びその後の多くの論文
- Z.S.Zhao, JMP 32(1991)2783

### 3. 解纏公式 (Disentangling formula)

◎ BCH(Baker-Campbell-Hausdorff) 公式

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}([A,[A,B]]+[A,B],B)+\dots} \quad (\text{A.22})$$

導出は、左辺の対数を  $e^A e^B - 1$  のべきに展開しそれをさらに  $A, B$  とその交換子であらわす。一般形は  $e^A e^B = e^C$  とすると、<sup>3</sup>

$$C = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{p_1, \dots, q_m} \frac{(-)^{m-1}}{m} \frac{1}{p_1! q_1! \dots p_m! q_m!} \frac{1}{p_1 + q_1 + \dots + p_m + q_m} \quad (\text{A.23})$$

$$\times [A^{p_1}, [B^{q_1}, [\dots [A^{p_m}, B^{q_m}] \dots]]] \quad (\text{A.24})$$

ここで、 $p_i, q_i \leq 0$  かつ  $p_i + q_i > 0$ 。

◎ Zassenhaus 公式

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]} e^{\frac{1}{6}[A,[A,B]] - \frac{1}{3}[A,B],B} \dots \quad (\text{A.25})$$

(この公式は例えば、非可換な量を含むハミルトニアン の 径路積分の導出などに利用される。)

これらの右辺では無限に項が続くが、どこかの次数の交換子が全てゼロになれば有限項で切れる。また、演算子  $\hat{A}, \hat{B}$  および それらの交換子などが代数的に閉じている場合には(例: リー代数)、やはり有限で閉じた公式が導ける。(角運動量代数に関する以下の例参照。) これらの公式は様々な一般化がなされている。

◎ Trotter 公式

$$e^{A+B} = \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{A/n} e^{B/n})^n \quad (\text{A.26})$$

### 4. 分解公式

一般線型群 (あるいはその部分群) について、いろいろな分解公式が知られている (ガウス分解、極分解、カルタン分解、など)。解纏公式では無限に続く場合も閉じた形で書くことができる。<sup>4</sup>

例: SU(2) の分解公式

SU(2) のリー代数  $J_{\pm} \equiv J_x \pm iJ_y, J_z$  の交換関係は:

$$[J_z, \hat{J}_{\pm}] = \pm J_{\pm}, \quad [J_+, J_-] = 2J_z \quad (\text{A.27})$$

このとき、 $\theta$  をパラメタとして、次の関係が成立する。

$$e^{\theta(\hat{J}_+ - \hat{J}_-)} = e^{\hat{J}_+ \tan \theta} e^{-2\hat{J}_z \log |\cos \theta|} e^{-\hat{J}_- \tan \theta} \quad (\text{A.28})$$

[証明]:

<sup>3</sup>山内・杉浦「連続群論入門」

<sup>4</sup>極分解: 任意の正規な行列 ( $GL(n, \mathbf{C})$  の元)  $A$  は、

$$A = UR \quad (U: \text{ユニタリ行列}, \quad R: \text{正定値エルミット行列})$$

と分解できる。

[証明]: まず  $A^\dagger A$  を対角化して  $\text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots)$  とするユニタリ行列  $V$  を考え、 $R = V \cdot \text{diag}(\lambda_1^{1/2}, \lambda_2^{1/2}, \dots) V^\dagger = (A^\dagger)^{1/2}$  を定義し、 $U = AR^{-1}$  とおけばよい。

i) 三つの未知関数  $f(\theta), g(\theta), h(\theta)$  を用いて次のように置く :

$$U = e^{\theta(J_+ - J_-)} = e^{\hat{J}_+ f(\theta)} e^{\hat{J}_z g(\theta)} e^{\hat{J}_- h(\theta)} \equiv U_f U_g U_h \quad (\text{A.29})$$

ii) 両辺を  $\theta$  で微分し、両辺に  $U^{-1}$  を右からかけて

$$J_+ - J_- = f' J_z + g' U_f J_z U_f^{-1} + h' U_f U_g J_- U_g^{-1} U_f^{-1} \quad (\text{A.30})$$

iii) 上の展開公式を用いて

$$U_f J_z U_f^{-1} = J_z - f J_+, \quad U_f U_g J_- U_g^{-1} U_f^{-1} = e^{-g} (J_- + 2f J_z - f^2 J_+) \quad (\text{A.31})$$

iv) ii) の両辺の  $J_{+,z,-}$  の係数を比較して、 $f, g, h$  の微分方程式系が得られる :

$$f' = 1 + f^2, \quad g' = 2f, \quad h' = -e^g \quad (\text{A.32})$$

v)  $\theta = 0$  での等式から初期条件として  $f(0) = g(0) = h(0) = 0$  が得られ、微分方程式を解くと :

$$f(\theta) = \tan \theta = -h(\theta), \quad g(\theta) = -2 \ln |\cos \theta| \quad (\text{A.33})$$

より簡単な証明としては、 $SU(2)$  の基本表現 (二次元) を用いて両者を比較することによっても可能。<sup>5</sup> この方法では、

$$J_+ \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z \rightarrow \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}, \quad J_- \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.34})$$

として両辺を比較すればよい。

より一般的な公式として、

$$e^{w_+ J_+ + w_z J_z + w_- J_-} = e^{x_+ J_+} e^{\ln x_z J_z} e^{x_- J_-} = e^{y_-} e^{\ln y_z J_z} e^{y_+ J_+} \quad (\text{A.35})$$

とするとき、 $K \equiv (w_+ w_- + w_z^2/4)^{1/2}$  を用いて次式が導かれる :

$$x_+ = \frac{w_+}{K \coth K - \frac{1}{2} w_z}, \quad x_- = \frac{w_-}{K \coth K - \frac{1}{2} w_z}, \quad x_z^{1/2} = \frac{K / \sinh K}{K \coth K - \frac{1}{2} w_z} \quad (\text{A.36})$$

および

$$y_+ = \frac{w_+}{K \coth K + \frac{1}{2} w_z}, \quad y_- = \frac{w_-}{K \coth K + \frac{1}{2} w_z}, \quad y_z^{1/2} = \frac{K \coth K + \frac{1}{2} w_z}{K / \sinh K} \quad (\text{A.37})$$

これより、例えば、

$$e^{\zeta J_+ - \zeta J_-} = e^{z J_+} e^{\ln(1+z^* z) J_z} e^{-z^* J_-} = e^{-z^* J_-} e^{-\ln(1+z^* z) J_z} e^{z J_+} \quad (\text{A.38})$$

で  $\zeta$  と  $z$  の関係は

$$\zeta = \frac{1}{2} \theta e^{-i\varphi} \quad \leftrightarrow \quad z = e^{-i\varphi} \tan \frac{1}{2} \theta \quad (\text{A.39})$$

これらの方法はより一般的な場合にも適用できる。例えば

$$e^{\alpha J_-} e^{\beta J_+} = \exp\left\{\frac{\beta}{1 + \alpha\beta}\right\} \exp\left\{2 \ln \frac{1}{1 + \alpha\beta} J_z\right\} \exp\left\{\frac{\alpha}{1 + \alpha\beta} J_-\right\} \quad (\text{A.40})$$

<sup>5</sup>F.Arecchi et al., Phys.Rev.A6(1972)2211 付録参照。



## A.4 群とフーリエ級数、特殊関数

群の表現は、直交関数系による展開と関係している。例えば、 $SO(3)$  の場合は、空間座標を用いて代数を実現すると、表現空間のベクトルは、球関数に対応する。またトーラス群  $\mathbf{T}$  は円周に実現することにより、フーリエ級数の基底を与える。より一般の場合は Peter-Weyl の定理によって示される。

- $SO(3)$  と球関数
- ベッセル関数
- アフィン群とウェーブレット

## G. 一般コヒーレント状態と曲面上の力学

コヒーレント状態の概念を一般化 (GCS:Generalized Coherent State) することにより、多体系の状態を GCS の重ね合わせとしてあらわすことができる。GCS のパラメタ空間上の変分原理は多体系の平均場理論をあらわす。また、系の伝播関数を径路積分を通じてあらわすことにより、動的 (時間依存) 平均場理論が導かれる。これは古典力学系の特徴を持っているが、半古典近似により、量子論的物理量を導くことができる。<sup>6</sup>

### G.1 ボソン・コヒーレント状態

#### G.1.1 定義

ボソン演算子:  $b^\dagger, b$

$$[b, b^\dagger] = 1, \quad [b, b] = [b^\dagger, b^\dagger] = 0 \quad (\text{G.1})$$

状態空間:

$$b|0\rangle = 0, \quad |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(b^\dagger)^n|0\rangle \quad (\text{G.2})$$

ここで、

$$\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle, \quad \hat{n} = b^\dagger b \quad (\text{G.3})$$

コヒーレント状態 (CS): ( $\alpha$  は複素数)<sup>7</sup>

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha b^\dagger} |0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (\text{G.4})$$

平均粒子数を  $n_0$  とおくと、

$$n_0 = \langle \alpha | \hat{n} | \alpha \rangle = |\alpha|^2 \quad (\text{G.5})$$

その揺らぎは

$$\Delta n = [\langle \alpha | (\hat{n} - n_0)^2 | \alpha \rangle]^{1/2} = \sqrt{n_0} \quad (\text{G.6})$$

従って粒子数の相対的な揺らぎは  $1/\sqrt{n_0}$  であり、大きい粒子数に対しては (G.4) の粒子数分布が  $n_0$  近傍に鋭いピークをもっており、ゆらぎは無視できる。

---

6

- A.Perelomov, 'Generalized Coherent States and Their Applications'(Springer,1986)
- J.R.Klauder & B.S.Skagerstam, 'Coherent States' (World Scientific, 1985)
- B.-Y.Hou & B.-Y. Hou, 'Differential Geometry for Physicists' (World Scientific, 1997)
- W.-M.Zhang, D.H.Feng & R.Gilmore, 'Coherent states: Theory and some applications' Rev.Mod.Phys.62(1990)867.
- 倉辻比呂志「幾何学的量子力学」(シュプリンガーフェアラーク東京,2005)
- H.Kuratsuji & T.Suzuki, PL92B(80)19.; T.Suzuki, Nucl.Phys.A398(1983)557.

<sup>7</sup>以下では殆どの場合、複素リー代数を前提する。(K = C)

### G.1.2 コヒーレント状態の特徴

i) 過完全性 (overcompleteness)  $\Rightarrow$  「1」の分解

$$\hat{I} \equiv \int d\mu(\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha| = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\text{Re}\alpha d\text{Im}\alpha}{\pi} |\alpha\rangle\langle\alpha| = 1 \quad (\text{G.7})$$

証明

- a) 各  $|n\rangle$  に対して  $\hat{I}|n\rangle = |n\rangle$  を証明できる。  
 b) (又は)  $[b, \hat{I}] = [b^\dagger, \hat{I}] = 0$  および  $\langle 0|\hat{I}|0\rangle = 1$  より。

ii) 消滅演算子の固有状態

$$b|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (\text{G.8})$$

証明:  $e^{-\alpha b^\dagger} b e^{\alpha b^\dagger} = b + \alpha$  より。

iii) 最小不確定性 (Minimum uncertainty wave packet)

次式で正準共役な変数を導入 ( $\xi\eta = 1$  とする):

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\xi\hbar}{2}}(b^\dagger + b), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\eta\hbar}{2}}(b^\dagger - b) \quad (\text{G.9})$$

$$\rightarrow [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (\text{G.10})$$

逆変換は

$$b^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \frac{\hat{x}}{\sqrt{\xi}} - \frac{i\hat{p}}{\sqrt{\eta}} \right) \quad (\text{G.11})$$

また、状態  $|\alpha\rangle$  での期待値を定義:

$$x_0 = \langle \alpha|\hat{x}|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\xi\hbar}{2}}(\alpha^* + \alpha), \quad p_0 = \langle \alpha|\hat{p}|\alpha\rangle = i\sqrt{\frac{\eta\hbar}{2}}(\alpha^* - \alpha) \quad (\text{G.12})$$

とおく。その揺らぎは

$$(\Delta x)^2 = \langle \alpha|(\hat{x} - x_0)^2|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2}\xi, \quad (\Delta p)^2 = \langle \alpha|(\hat{p} - p_0)^2|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2}\eta \quad (\text{G.13})$$

従って、

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{1}{2}\hbar \quad (\text{G.14})$$

また、 $\hat{x}$  の固有状態  $|x\rangle: \hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$  に対し、

$$\langle x|\alpha\rangle = A e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x} e^{-\frac{1}{2\hbar}\sqrt{\frac{\pi}{\xi}}(x-x_0)^2} \quad (A \text{ は規格化定数}) \quad (\text{G.15})$$

なお、変数  $p_0, x_0$  を用いれば

$$d\mu(\alpha) = \frac{dx_0 dp_0}{2\pi\hbar} \quad (\text{G.16})$$

iv) 「コヒーレンス」(位相がそろった状態)

$\alpha = r e^{i\theta}$  とおくと、

$$|\alpha\rangle = e^{i\hat{n}\theta} e^{-r^2/2} \sum_n \frac{r^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (\text{G.17})$$

すなわち、 $|\alpha\rangle$  はゲージ空間で角度  $\theta$  回転を行なった状態。なお、

$$-i \frac{\partial}{\partial \theta} |\alpha\rangle = \hat{n} |\alpha\rangle \quad (\text{G.18})$$

であり、 $\theta$  は粒子数に共役な位相とみなされる。ただし、粒子数に下限があるため、位相演算子を定義するには困難がある。<sup>8</sup> そこで、近似的に位相因子  $\exp(i\theta)$  に対応する演算子

$$\hat{E}^\dagger \equiv b^\dagger \frac{1}{\sqrt{b b^\dagger}}, \quad [\hat{n}, \hat{E}^\dagger] = \hat{E}^\dagger \quad (\text{G.19})$$

を考えよう。この演算子は

$$\hat{E} \hat{E}^\dagger = 1, \quad \hat{E}^\dagger \hat{E} = 1 - |0\rangle\langle 0| \quad (\text{G.20})$$

であるから、完全なユニタリ演算子ではない。このとき位相をそろえて作った状態

$$|\tilde{\theta}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=0}^{N-1} e^{-im\theta} |m\rangle \quad (\text{G.21})$$

を考えると、これは

$$\hat{E}^\dagger |\tilde{\theta}\rangle = e^{i\theta} |\tilde{\theta}\rangle + \frac{1}{\sqrt{N}} (e^{iN\theta} |N\rangle - |0\rangle) \quad (\text{G.22})$$

を満たしており、位相の固有状態を近似するものと解釈できる。これに対して、コヒーレント状態は粒子数の不確定性を抑えて位相を揃えた状態になっている。

v) コヒーレント状態表示 (連続表現) :

完全性条件により、波動関数を  $|\alpha\rangle$  で表現できる。このとき、

$$\langle \alpha | \psi \rangle = \int d\mu(\beta) K(\alpha, \beta) \langle \beta | \psi \rangle \quad (\text{G.23})$$

ここで、 $K$  は

$$K(\alpha, \beta) = \langle \alpha | \beta \rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2 - \frac{1}{2}|\beta|^2 + \alpha^* \beta} \quad (\text{G.24})$$

であり、'Reproducing kernel' となる :

$$K(\alpha, \beta) = \int d\mu(\gamma) K(\alpha, \gamma) K(\gamma, \beta) \quad (\text{G.25})$$

<sup>8</sup>Carruthers & Nieto, RMP40(1968)411.

vi) ユニタリ形

次の演算子を定義する：

$$D(\alpha) = e^{\alpha b^\dagger - \alpha^* b} = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha b^\dagger} e^{-\alpha^* b} \quad (\text{G.26})$$

第二式は、Zassenhaus 公式の特別の場合で、

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{[A,B]/2} \quad (\text{但し } [A,B] \text{ が } A, B \text{ と可換のとき}) \quad (\text{G.27})$$

から導かれる。従って、

$$|\alpha\rangle = D(\alpha)|0\rangle \quad (\text{G.28})$$

vii) 群の表現としてのコヒーレント状態

Heisenberg-Weyl 代数 ( $\hat{n}$  を入れる場合も)

$$[b, b^\dagger] = I, \quad [b, I] = [b^\dagger, I] = 0 \quad (1 = I \text{ と書いた}) \quad (\text{G.29})$$

に対する群の要素は、パラメタ  $g = (\alpha, \varphi)$  を用いて

$$U(g) = e^{\alpha b^\dagger - \alpha^* b + i\varphi I} = D(\alpha) e^{i\varphi I} \quad (\text{G.30})$$

このうち最後の因子は  $U(1)$  で単なる位相因子であり、この位相因子の違いを同一視したコヒーレント状態は射線表現を与えている。群としての積は、 $g = (\alpha, \varphi), h = (\beta, \psi)$  とおくと

$$U(g)U(h) = e^{(\alpha+\beta)b^\dagger - (\alpha^*+\beta^*)b} e^{i\{\varphi+\psi+\frac{1}{2}(\alpha^*\beta-\alpha\beta^*)\}} \quad (\text{G.31})$$

より、 $gh = (\alpha + \beta, \varphi + \psi + \frac{1}{2}(\alpha^*\beta - \alpha\beta^*))$  となる。i) の「1の分解」は、この群上の不変な積分から導かれる：

$$\int d\mu(g) |g\rangle\langle g| = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \int d\mu(\alpha) |g\rangle\langle g| = \int d\mu(\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (\text{G.32})$$

viii) 演算子の表現と  $P, Q$  シンボル：古典的位相空間で演算子の表現をする方法として、コヒーレント状態を利用することができる。任意の演算子  $A$  に対する表現として  $Q$  シンボル (covariant symbol)：

$$A_Q(\alpha) \equiv \langle\alpha|A|\alpha\rangle \quad (\text{G.33})$$

とくに、normal order になっていれば、

$$A = \sum_{k,\ell} c_{k\ell} (b^\dagger)^k b^\ell \quad \leftrightarrow \quad A_Q(\alpha) = \sum_{k,\ell} c_{k\ell} (\alpha^*)^k \alpha^\ell \quad (\text{G.34})$$

$P$  シンボル (contravariant symbol)：

$$A = \int d\mu(\alpha) A_P(\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (\text{G.35})$$

とくに、antinormal order になっていると

$$A = \sum_{m,n} d_{mn} b^m (b^\dagger)^n \quad \leftrightarrow \quad A_P(\alpha) = \sum_{m,n} d_{mn} \alpha^m (\alpha^*)^n \quad (\text{G.36})$$

ただし、CSの過完全性のため、 $A_P$  はユニークには定まらない。

以下で用いる経路積分表示の導出では、ハミルトニアン  $H$  の  $Q$  シンボルが古典力学系のハミルトニアンを与える。 $P$  シンボルに基づく経路積分表示を用いることも可能であり、この場合の古典ハミルトニアンは  $Q$  シンボルの場合と必ずしも一致しない。(↔ Weyl ordering および Wigner 表示。)

### G.1.3 コヒーレント状態に基づく径路積分

通常の径路積分の導出にならい、完全性関係を各時間ステップで挿入することにより、径路積分表示が得られる。<sup>9</sup> ボソン演算子  $b^\dagger, b$  であらわされる系のハミルトニアンを  $H$  とするとき（時間  $t$  に依存しないと仮定）、伝播関数 (Propagation kernel) を

$$K(\alpha_f, \alpha_i; t) \equiv \langle \alpha_f | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | \alpha_i \rangle \quad (\text{G.37})$$

とおけば、任意の状態の時間発展はコヒーレント状態表示で

$$\langle \alpha | \psi(t) \rangle = \int d\mu(\beta) K(\alpha, \beta; t) \langle \beta | \psi(t=0) \rangle \quad (\text{G.38})$$

$\epsilon = t/n$  として  $n \rightarrow \infty$  とすることにより、

$$K(\alpha_f, \alpha_i; t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^n d\mu(\alpha_k) \prod_{k=0}^n \langle \alpha_{k+1} | (1 - \frac{i}{\hbar} H \epsilon) | \alpha_k \rangle \quad (\text{G.39})$$

$$= \lim \int \prod d\mu(\alpha_k) \exp \left\{ \sum_{k=0}^n (\ln \langle \alpha_{k+1} | \alpha_k \rangle - \frac{i}{\hbar} \epsilon \langle \alpha_{k+1} | H | \alpha_k \rangle) \right\} \quad (\text{G.40})$$

ここで境界条件は、<sup>10</sup>

$$\alpha_0 = \alpha_i, \alpha_{n+1} = \alpha_f \quad (\text{G.41})$$

指数関数の中の第一の因子は

$$\ln \langle \alpha_k | \alpha_{k-1} \rangle = \frac{i\epsilon}{\hbar} \left[ \frac{i\hbar}{2\epsilon} \alpha_k^* (\alpha_k - \alpha_{k-1}) - (\alpha_k^* - \alpha_{k-1}^*) \alpha_{k-1} \right] \quad (\text{G.42})$$

と書くことができる。 $\epsilon \rightarrow 0$  で形式的に消える項を除くと、<sup>11</sup> 結果は

$$K(\alpha_f, \alpha_i) = \int \mathcal{D}\mu(\alpha) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right), \quad S = \int_0^t \mathcal{L}[\alpha(s)] ds \quad (\text{G.43})$$

とあらわされる。ただし、

$$\mathcal{L} = \langle \alpha(t) | i\hbar \partial_t - H | \alpha(t) \rangle = \frac{i\hbar}{2} (\dot{\alpha} \alpha^* - \alpha \dot{\alpha}^*) - \mathcal{H}(\alpha^*, \alpha), \quad (\text{G.44})$$

$$\mathcal{H}(\alpha^*, \alpha) = \langle \alpha | H | \alpha \rangle \quad (\text{G.45})$$

であり、経路  $\alpha(s)$  の境界条件は

$$\alpha(0) = \alpha_i, \quad \alpha(t) = \alpha_f \quad (\text{G.46})$$

ここで

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \frac{x}{\sqrt{\xi}} + i \frac{p}{\sqrt{\eta}} \right), \quad (\xi\eta = 1) \quad (\text{G.47})$$

<sup>9</sup>S.S.Schweber, JMP

Izykson Zuber の教科書でもこの方式を採用

<sup>10</sup>この第一の条件は本来は  $\alpha_{n+1}^* = \alpha_f^*$  とすべきだろう。この問題は古典経路を求める際に影響する。後の半古典論的な議論では、古典経路  $\alpha(t)$  があるとき、複素共役の経路も条件を満たすとした扱いを考えている。

<sup>11</sup>もちろん、経路は一般に連続ではないので、これは形式上の約束と考える。

によって変数を  $x, p$  に変えると、

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(p\dot{x} - x\dot{p}) - \mathcal{H} \quad (\text{G.48})$$

となり通常の作用原理と類似の形になる。実際この形は、通常ファインマン経路積分の導出において中間状態に運動量積分を余分に含めた位相空間経路積分とおなじ形をしている。<sup>12</sup> 違いは、 $\mathcal{H}$  および境界条件にあらわれる。

系の作用積分が  $\hbar$  に比べて大きい場合（古典的な場合）は、変分原理

$$\delta S[\alpha(\cdot)] = 0 \quad (\text{G.49})$$

を満たす経路が経路積分に主要な寄与をすると考えられる。ここから得られる方程式は

$$i\hbar\dot{\alpha} = \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \mathcal{H} \quad (\text{G.50})$$

およびその複素共役の方程式である。これを変数  $p, x$  で表せば、通常ハミルトンの運動方程式。

この方程式は、しかし、一般の境界条件 (G.46) に対して解をもたない。これは、この条件が位相空間で始点・終点をともに指定していることから明かである。（始点だけ指定すれば、時刻  $t$  での終点の位置が定まる。）これはコヒーレント状態であらわされる位相空間内の波束が中心のまわりに有限のひろがりをもつことが境界条件に反映されていないことによる。これは、経路積分に基づいて半古典論を展開する際に問題となる。

### G.1.5 ボソン多体系とコヒーレント状態

コヒーレント状態があらわれる多体系の例として、外場中におかれた相互作用するボース粒子系の温度ゼロにおける平均場理論を考えよう。これは最近の極低温原子気体で広汎に用いられている Gross Pitaevskii 方程式に導き、その揺らぎは長波長でフォノン型励起となる Bogoliubov モードを与える。

外場  $U(\vec{r})$  中の粒子系のハミルトニアン

$$H = K + U + V \quad (\text{G.51})$$

$$= \int d\vec{r} \phi^\dagger (\vec{p}^2 2m + U(\vec{r})) \phi + \frac{1}{2} \int d\vec{r} d\vec{r}' \phi^\dagger(\vec{r}) \phi^\dagger(\vec{r}') v(\vec{r} - \vec{r}') \phi(\vec{r}') \phi(\vec{r}) \quad (\text{G.52})$$

において、ボース場を適当な一粒子基底で展開する：

$$\phi(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \varphi_{\alpha}(\vec{r}) b_{\alpha}, \quad [b_{\alpha}, b_{\beta}^{\dagger}] = \delta_{\alpha\beta} \quad (\text{G.53})$$

基底状態ではある一粒子状態  $\varphi_0(\vec{r})$  に粒子が凝縮していると考えて  $N$  粒子系の変分波動関数

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (b_0^{\dagger})^N |0\rangle \quad (\text{G.54})$$

<sup>12</sup>Garrod, RMP38(1966)483.

においてエネルギー期待値が最小になる条件を求めると

$$\left[ -\frac{\nabla^2}{2m} + U(\vec{r}) + (N-1) \int d\vec{r}' |\varphi_0(\vec{r}')|^2 v(\vec{r} - \vec{r}') \right] \varphi_0(\vec{r}) = \mu \varphi_0(\vec{r}) \quad (\text{G.55})$$

という非線形の方程式がえられる。希薄な系では

$$v(\vec{r} - \vec{r}') = g\delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad g = \frac{4\pi\hbar^2}{m}a \quad (\text{G.56})$$

のように  $s$  波散乱長  $a$  による擬ポテンシャルを用いることが多い。得られた三次元の非線形シュレディンガー方程式を Gross-Pitaevskii 方程式と呼んでいる。

この形式はボース粒子数を保存する取り扱いをしている。集団的励起状態を求めるには、むしろ異なる扱いが便利。そこで、(G.53) 式において、ある状態  $\varphi_0$  の生成消滅演算子を定数部分とその揺らぎに分解する：

$$b_0 = z + \tilde{b}, \quad [\tilde{b}, \tilde{b}^\dagger] = 1 \quad (\text{G.57})$$

これは、(G.26) 式のユニタリ変換に対応している：

$$\tilde{b} = D(z)b_0D(z)^{-1}, \quad D(z) = \exp zb_0^\dagger - z^*b_0 \quad (\text{G.58})$$

これはボース粒子数を保存しないので、平均粒子数保存のためのラグランジュ乗数項を加えてハミルトニアンを書き直すと、

$$H - \mu\hat{N} = \mathcal{E} + H_1 + H_2 + \dots \quad (\text{G.59})$$

と書ける。ここで、各項は演算子  $\tilde{b}, b_{\alpha \neq 0}$  に関してゼロ次、一次、二次、およびそれ以上の項であり、

$$\mathcal{E} = (h_{00} - \mu)z^*z + \frac{1}{2}v_{0000}z^*z^*zz, \quad (\text{G.60})$$

$$H_1 = (h_{00} - \mu)(z\tilde{b}^\dagger + z^*\tilde{b}) + v_{0000}(z^*zz\tilde{b}^\dagger + \text{h.c.}) \quad (\text{G.61})$$

$$+ \sum_{\alpha \neq 0} (h_{\alpha 0}z b_\alpha^\dagger + \text{h.c.}) + \sum_{\alpha \neq 0} v_{\alpha 000}z^*zz b_\alpha^\dagger + \text{h.c.}) \quad (\text{G.62})$$

$$H_2 = (h_{00} - \mu)\tilde{b}^\dagger\tilde{b} + \frac{1}{2}v_{0000}(4z^*z\tilde{b}^\dagger\tilde{b} + z^*z^*\tilde{b}\tilde{b} + zz\tilde{b}^\dagger\tilde{b}^\dagger) \quad (\text{G.63})$$

$$+ \sum_{\alpha \neq 0} (h_{\alpha 0}b_\alpha^\dagger\tilde{b} + \text{h.c.}) + \dots \quad (\text{G.64})$$

等となっている。ただし、

$$h_{\alpha\beta} = \langle \varphi_\alpha | (K + U) | \varphi_\beta \rangle, \quad v_{\alpha\beta\gamma\delta} = \langle \varphi_\alpha \varphi_\beta | V | \varphi_\gamma \varphi_\delta \rangle \quad (\text{G.65})$$

ここで定数項  $\mathcal{E}$  を粒子数条件  $z^*z = N$  のもとで最小にすると、ふたたび Gross-Pitaevskii 方程式 (G.55) が得られる。ただし、相互作用項の係数は  $N-1$  の代わりに  $N$  がかかる。以上の導出は粒子数の固有状態の代わりに、コヒーレント状態  $D(z)|0\rangle$  を用いて変分を行ないパラメタ  $z, \mu$  を定めることになっているが、前述のように、粒子数が多い状態ではこの二つの方法は期待値に関する限り  $O(1/N)$  の違いしかもたらさない。



励起状態については、このように定めたパラメタのもとでハミルトニアンを対角化することによって決められる。ただし、変分条件から  $H_1 = 0$  となるので、 $H_2$  を対角化すれば近似解が求められる。 $H_2$  の構造は

$$H_2 \sim (\tilde{b}^\dagger \tilde{b} + \tilde{b}^\dagger b + b^\dagger \tilde{b} + b^\dagger b) + (\tilde{b}^\dagger \tilde{b}^\dagger + \tilde{b}^\dagger b^\dagger + b^\dagger b^\dagger + \text{h.c.}) \quad (\text{G.66})$$

の構造をしているため、

$$\Gamma^\dagger = \xi \tilde{b}^\dagger + \eta \tilde{b} + \sum_{\alpha \neq 0} (\xi_\alpha b_\alpha^\dagger + \eta_\alpha b_\alpha) \quad (\text{G.67})$$

の形によって対角化できる。この結果は

$$\Omega \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} \quad (\text{G.68})$$

となり、通常のRPA型方程式の対称性をもっている。とくに、 $\Omega = 0$  の解として粒子数の揺らぎ

$$\tilde{N} = z \tilde{b}^\dagger + z^* \tilde{b} \quad (\text{G.69})$$

が得られる。また、とくに無限一様系 ( $U = 0, \alpha \rightarrow \vec{k}$ ) では、対角化されたモードのエネルギーは

$$\Omega_k = [\epsilon_k^2 + 2Ng\epsilon_k]^{1/2}, \quad \epsilon_k = \frac{\vec{k}^2}{2m} \quad (\text{G.70})$$

の形となり (この場合  $N$  は密度)、 $\vec{k} \rightarrow 0$  でフォノン型となる。

## G.2 スピン・コヒーレント状態 (SU(2) コヒーレント状態)

前節でみたように、通常のボソン・コヒーレント状態 (CS) は種々の性質をもつ。CS をより一般の場合に拡張する試みが数多くなされた。とくに、性質 i), ii), iii) のどの性質に注目するかにより、異なる一般化が可能になる。最も多いのは、i), v) にみられるCSの群論的特徴を生かしもので、まずスピン系で議論され、次いで一般の群論的な定式化がなされた。<sup>13</sup> ここでは SU(2) 代数にもとづくスピン・コヒーレント状態の定式化を示す。(以下では、角運動量演算子を含め一般にスピンと呼んでおく。)

### G.2.1 スピン・コヒーレント状態

スピン演算子:  $J_+, J_-, J_0$

$$[J_0, J_{\pm}] = \pm J_{\pm}, \quad [J_+, J_-] = 2J_0 \quad (\text{G.71})$$

この代数の既約表現は (半) 整数  $J = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$  で指定され、各表現の基底は

$$J_0|JM\rangle = M|JM\rangle, \quad J_{\pm}|JM\rangle = \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)}|J, M \pm 1\rangle \quad (\text{G.72})$$

で与えられる。以下では一つの既約表現を考え、その基準状態  $|0\rangle$  として、最小ウェイトの状態

$$|0\rangle \equiv |J, -J\rangle \quad (\text{G.73})$$

をとることにする。

- i) スピン・コヒーレント状態の定義:  
複素パラメタ  $z$  を用いて

$$|z\rangle = \mathcal{N}^{-1/2}|z\rangle = (1 + z^*z)^{-J} e^{zJ_+}|0\rangle, \quad \mathcal{N} = \langle z|z\rangle = (1 + z^*z)^{2J} \quad (\text{G.74})$$

を定義すると、これは overcomplete な基底を張る。角運動量基底では、

$$(J_+)^n|0\rangle = \left[ \frac{(2J)!n!}{(2J-n)!} \right]^{1/2} |J, -J+n\rangle \quad (\text{G.75})$$

<sup>13</sup>スピン系への拡張は

- J.Radcliffe, JPA4(1971)313.
- F.T.Arrecchi, et al., PRA 前掲.

などであり、一般論は

- J.R.Klauder, Ann.Phys.11(1960)123.
- A.M.Perelomov, CMP26(1972)222.
- R.Gilmore, Ann.Phys.74(1972)391.

このうち、最初の論文は連続パラメタによる量子力学の表現を定式化したもの。次も参照。

- E.Onofri, JMP16(1975)1087.
- F.A.Berezin, CMP40(1975)153.

を用いると

$$|z\rangle = \mathcal{N}^{-1/2} \sum_{n=0}^{2J} z^n \binom{2J}{n}^{1/2} |J, -J+n\rangle \quad (\text{G.76})$$

この状態はユニタリ形

$$|z\rangle = U(\zeta)|0\rangle, \quad U(\zeta) = e^{\zeta J_+ - \zeta^* J_-} \quad (\text{G.77})$$

にもあらわされる。両者のパラメタの関係は

$$\zeta = \frac{1}{2}\theta e^{-i\varphi} \quad \leftrightarrow \quad z = \tan\left(\frac{1}{2}\theta\right)e^{-i\varphi} \quad (\text{G.78})$$

ii) 完全性関係は

$$\int d\mu(\zeta) |z\rangle \langle z| = \sum_M |JM\rangle \langle JM| = 1 \quad (\text{G.79})$$

ただし、測度は

$$d\mu(z) = \frac{2J+1}{\pi} \frac{d\text{Re}z d\text{Im}z}{(1+|z|^2)^J} = \frac{2J+1}{4\pi} \sin\theta d\varphi d\theta \quad (\text{G.80})$$

となる。なお、群  $SU(2)$  の要素は一般に

$$U(\beta, \gamma) = e^{\beta S_+ - \beta^* S_- + i\gamma S_0} \quad (\text{G.81})$$

とあらわされるが、 $U$  を分解することにより、 $S_0$  に関する部分は、基準状態への位相の寄与を与えるので、スピノール空間  $SU(2)/U(1)$  上で定義される。この商空間は等質空間になっており、(G.80) からわかるように、球面 ( $S_2$ ) に同型。

iii) 基準状態は  $S_-|0\rangle = 0$  を満たすが、一般のスピノール空間は、 $S_-$  の固有状態とはならない。ボソンの場合に対応する関係は、 $J_0|0\rangle = -J|0\rangle$  および  $J_-|0\rangle = 0$  から得られる関係式

$$(J_0 - zJ_+ + J)|z\rangle = 0, \quad (J_- + 2zJ_0 - z^2J_+)|z\rangle = (J_- + zJ_0 - zJ)|z\rangle = 0 \quad (\text{G.82})$$

iv) パラメタ空間が球面であるため、最小不確定性の概念をそのまま適用できないが、古典的対応を与えることは可能。 $|z\rangle$  による期待値を  $\langle \rangle$  であらわせば、

$$\langle J_z \rangle = -J \frac{1 - z^*z}{1 + z^*z} = -J \cos\theta, \quad (\text{G.83})$$

$$\langle J_x \rangle = J \frac{z + z^*}{1 + z^*z} = J \sin\theta \cos\varphi, \quad (\text{G.84})$$

$$\langle J_y \rangle = iJ \frac{z - z^*}{1 + z^*z} = J \sin\theta \sin\varphi \quad (\text{G.85})$$

となり、球面上の波束に対応することが見て取れる。

- v) 既約表現内の任意の波動関数は、スピノCS表示で  $\langle z|\psi\rangle$  のように表あらわされ、Reproducing kernel は

$$K(y, z) = \langle y|z\rangle = \left[ \frac{(1 + y^*z)^2}{(1 + y^*y)(1 + z^*z)} \right]^J \quad (\text{G.86})$$

- vi) ボソノCSの場合と同様、伝播関数に対する経路積分表示を導くことができる。このとき作用関数にあらわれる関数  $\mathcal{L}$  は

$$\mathcal{L} = \langle z(t)|i\hbar\partial_t - H|z(t)\rangle = i\hbar J \frac{\dot{z}z^* - z\dot{z}^*}{1 + z^*z} - \mathcal{H}(z^*, z), \quad \mathcal{H}(z^*, z) = \langle z|H|z\rangle \quad (\text{G.87})$$

となる。これを球面座標であらわせば、

$$\mathcal{L} = J\hbar(1 - \cos\theta)\dot{\varphi} - \mathcal{H}(\theta, \varphi) \quad (\text{G.88})$$

変分原理に基づく古典力学の方程式は

$$i\hbar\dot{z} = -\frac{(1 + z^*z)^2}{2J} \frac{\partial}{\partial z^*} \mathcal{H} \quad (\text{G.89})$$

となり、球面上の計量に基づく運動方程式が得られる。例えば、ハミルトニアンが  $\vec{J}$  に比例するとき、この方程式はスピンの歳差運動を与える。

- vii) 変換

$$\beta = \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} = z(1 + z^*z)^{1/2} \quad (\text{G.90})$$

によって変数を  $\beta^*, \beta$  に置き換えると、正準共役な形になおすことができる。このとき、積分測度も

$$d\mu[z] = \frac{2J+1}{2\pi} d\beta^* d\beta \quad (\text{G.91})$$

となり、平面上の力学に置き換えられる。

## G.2.2 スピノCSの例：BCS状態

◎準スピン（詳しくは次章）

S波対相関はSU(2)の代数的構造をもち、準スピンによって記述される。<sup>14</sup> 角運動量  $j$  で、磁気量子数  $\mu = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots, \pm j$  の一粒子状態におけるフェルミ粒子の生成消滅演算子：

$$c_\mu^\dagger, c_\mu \quad [c_\nu, c_\mu^\dagger] = \delta_{\mu\nu} \quad (\text{G.92})$$

---

14

- P.W.Anderson, PR112(1958)1900.
- A.K.Kerman, AP12(1961)300.
- M. H. Macfarlane, "Shell Model Theory of Identical Nucleons" in Lect. Theor. Phys., ed. W. E. Britten (Interscience, N.Y., 1966), vol. III

対演算子の組（和は  $\mu$  の正負全体にわたる）：

$$S_+ = \frac{1}{2} \sum_{\mu} c_{\mu}^{\dagger} c_{\bar{\mu}}^{\dagger}, \quad S_- \equiv (S_+)^{\dagger}, \quad S_0 = \frac{1}{2} [S_+, S_-] = \frac{1}{2} \sum_{\mu} (c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} - 1) \quad (\text{G.93})$$

( $c_{\bar{\mu}}$  は時間反転した演算子→次章 P.1.1 参照。) このとき、一粒子生成・消滅演算子 ( $c_{\mu}^{\dagger}, c_{\bar{\mu}}$ ) および ( $c_{\bar{\mu}}^{\dagger}, -c_{\mu}$ ) は準スピンに関するスピノルの変換性をもつ (次章の準スピン・テンソル参照)：

$$[S_+, c_{\bar{\mu}}] = c_{\mu}^{\dagger}, \quad [S_-, c_{\mu}^{\dagger}] = c_{\bar{\mu}}, \quad [S_0, c_{\mu}^{\dagger}] = c_{\mu}^{\dagger}, \quad [S_0, c_{\bar{\mu}}] = -c_{\bar{\mu}} \quad (\text{G.94})$$

◎ BCS 状態とボゴリユーボフ変換

この準スピンに基づく GCS を考える (簡単のためパラメタは実数とする)。基準状態として、粒子のない状態

$$|0\rangle = |S = \frac{1}{2}D, S_0 = -\frac{1}{2}D\rangle, \quad (D = j + \frac{1}{2} : \text{対縮重度}) \quad (\text{G.95})$$

をとる。

$$|\theta\rangle = U(\theta)|0\rangle, \quad U(\theta) = \exp(i\theta S_y) = \exp\left\{\frac{\theta}{2}(S_+ - S_-)\right\} \quad (\text{G.96})$$

分解公式を用いて  $S_-, S_0$  に依存する因子を右にもっていくと、

$$|\theta\rangle = u^D \exp\left(\frac{v}{u} S_+\right) |0\rangle, \quad (\text{G.97})$$

ただし、

$$u = \cos \frac{\theta}{2}, \quad v = \sin \frac{\theta}{2}, \quad u^2 + v^2 = 1 \quad (\text{G.98})$$

とおいた。これは通常の BCS 状態に一致する。このことはスピノル  $c^{\dagger}, c$  の変換性からも見て取れる (ボゴリユーボフ変換)。

$$\begin{pmatrix} a_{\mu}^{\dagger} \\ a_{\bar{\mu}} \end{pmatrix} \equiv U(\theta) \begin{pmatrix} c_{\mu}^{\dagger} \\ c_{\bar{\mu}} \end{pmatrix} U(\theta)^{-1} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mu}^{\dagger} \\ c_{\bar{\mu}} \end{pmatrix} \quad (\text{G.99})$$

従って、

$$a_{\bar{\mu}}|\theta\rangle = U(\theta)c_{\bar{\mu}}U(\theta)^{-1}U(\theta)|0\rangle = 0 \quad (\text{G.100})$$

であり、状態  $|\theta\rangle$  は準粒子真空となる。このように、BCS 状態は、準スピン空間の回転に対応したスピン・コヒーレント状態となっている。

### G.3 フェルミ系の GCS

#### ◎多粒子系の代数と GCS

$M = m + n$  個の一粒子状態に分布する  $n$  粒子系を考える。基準状態  $|0\rangle$  として、(例えば、一粒子エネルギーの低い)  $n$  個の状態が詰まった状態を考える：

$$|0\rangle = \prod_{\alpha=1}^n c_{\alpha}^{\dagger} | \text{真空} \rangle \quad (\text{G.101})$$

但し、フェルミ場を

$$\psi(\vec{r}) = \sum_k \varphi_{\alpha}(\vec{r}) c_{\alpha}^{\dagger}, \quad \{c_{\alpha}, c_{\beta}^{\dagger}\} = \delta_{\alpha\beta} \quad (\text{G.102})$$

のように展開。粒子数を保存する演算子は、生成消滅演算子対  $\{c^{\dagger}c\}$  であらわされるため、系のダイナミクスはこの対演算子の運動方程式をもとに記述できる。これらは  $U(m+n)$  のリー代数を構成する：

$$[E_{\alpha\beta}, E_{\gamma\delta}] = \delta_{\beta\gamma} E_{\alpha\delta} - \delta_{\alpha\delta} E_{\beta\gamma}, \quad E_{\alpha\beta} \equiv c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \quad (\text{G.103})$$

$E_{\alpha\beta}$  を  $(n+m) \times (n+m)$  行列で  $\alpha$  行  $\beta$  列成分のみが 1 で他がゼロのものに対応させれば、 $E_{\alpha\beta}$  によって構成した群が  $U(M)$  に対応するのは明らか。

基準状態に即して、粒子・空孔準位を定義する ( $\alpha, \beta \rightarrow i, j, p, q, \dots$ )：

$$\text{空孔準位 : } i, j = 1, 2, \dots, n \quad \text{粒子準位 : } p, q = 1, 2, \dots, m \quad (\text{G.104})$$

このとき、 $\{E_{ij} = c_i^{\dagger} c_j\}$  の組、および  $\{E_{pq} = c_p^{\dagger} c_q\}$  の組は、それぞれ  $U(m)$  および  $U(n)$  のリー代数を与える。これらによって生成されるリー群の元は、基準状態  $|0\rangle$  を (位相因子内で) 不変に保つ：

$$\exp\{\sum \xi_{ij} c_i^{\dagger} c_j - \text{h.c.}\} |0\rangle \propto |0\rangle, \quad \exp\{\sum \eta_{pq} c_p^{\dagger} c_q - \text{h.c.}\} |0\rangle = |0\rangle \quad (\text{G.105})$$

すなわち、これらは群  $U(m+n)$  の等方部分群をつくる。GCS は、この等方部分群  $U(m) \times U(n)$  による商空間  $U(m+n)/U(m) \times U(n)$  (グラスマン多様体) 上の成分によって生成される：

$$|\zeta\rangle = U(\zeta)|0\rangle, \quad U(\zeta) = \exp\left(\sum_{p,i} c_p^{\dagger} c_i - \text{h.c.}\right) \equiv e^F \quad (\text{G.106})$$

GCS は  $mn$  個の複素パラメタ  $\zeta_{pi}$  によって特徴づけられる。(以下では  $\sum$  記号はしばしば省略。)

前の節の  $SU(2)$  は、 $m = n = 1$  の場合に対応する。

#### ◎スレーター行列としての GCS

上の GCS はやはり  $n$  粒子系のスレーター行列をあらわす。実際、次のように新しい演算子  $d_{\alpha}$  を定義する：

$$d_{\alpha} \equiv U(\zeta) c_{\alpha} U(\zeta)^{-1} = c_{\alpha} + [F, c_{\alpha}] + \frac{1}{2}[F, [F, c_{\alpha}]] + \dots \quad (\text{G.107})$$

この結果は

$$\begin{pmatrix} d_p \\ \vdots \\ d_i \\ \vdots \end{pmatrix} = U(\zeta) \begin{pmatrix} c_p \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{pmatrix} U(\zeta)^{-1} = \begin{pmatrix} \cos \zeta & -\sin \zeta \\ \sin \zeta & \cos \zeta^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_p \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (\text{G.108})$$

ただし、 $\zeta = \{\zeta_{pi}\}$  は  $m \times n$  行列であり、

$$\cos \zeta = 1 - \frac{1}{2!} \zeta \zeta^\dagger + \frac{1}{4!} \zeta \zeta^\dagger \zeta \zeta^\dagger - \dots, \quad (\text{G.109})$$

$$\cos \zeta^\dagger = 1 - \frac{1}{2!} \zeta^\dagger \zeta + \frac{1}{4!} \zeta^\dagger \zeta \zeta^\dagger \zeta - \dots, \quad (\text{G.110})$$

$$\sin \zeta = \zeta - \frac{1}{3!} \zeta \zeta^\dagger \zeta + \dots, \quad (\text{G.111})$$

はそれぞれ  $m \times m, n \times n, m \times n$  行列である。定義から明らかに、 $\{d_p, d_i\}$  はフェルミ粒子の交換関係を満たし、また

$$|\zeta\rangle = \prod_{i=1}^n d_i^\dagger | \text{真空} \rangle, \quad d_p |\zeta\rangle = 0 = d_i^\dagger |\zeta\rangle \quad (\text{G.112})$$

であるから、 $|\zeta\rangle$  は  $d_\alpha$  に対応する一粒子基底の波動関数に対応するスレーター行列となる。

上の GCS はユニタリ形だが、これを Thouless 型に書くことができる：

$$|\zeta\rangle = \mathcal{N}^{-1} |z\rangle, \quad |z\rangle = \exp\left(\sum z_{pi} c_p^\dagger c_i\right) |0\rangle \quad (\text{G.113})$$

ここで  $\mathcal{N}$  は規格化定数。パラメタ  $z$  と  $\zeta$  の関係は、例えば次のように導かれる。

$$0 = d_p |z\rangle = \{(\cos \zeta)_{pq} c_q - (\sin \zeta)_{pj} c_j\} |z\rangle = e^F e^{-F} \{\dots\} e^F |0\rangle \quad (\text{G.114})$$

$$= e^F \{c_q + (\cos \zeta)_{pq} z_{qj} c_j - (\sin \zeta)_{pj} c_j\} |0\rangle \quad (\text{G.115})$$

ここから、

$$z_{pi} = (\tan \zeta)_{pi}, \quad \tan \zeta = \zeta + \frac{1}{3} \zeta \zeta^\dagger \zeta + \dots \quad (\text{G.116})$$

Thouless の定理では、 $|0\rangle$  に直交しない任意のスレーター行列が  $|Z\rangle$  の形に書かれることを述べている。<sup>15</sup> ユニタリ形ではパラメタ  $\zeta$  の与え方によっては任意の粒子と空孔を完全に入れ替えることもできるため、 $\langle z|0\rangle = 0$  となることも可能。この場合は、規格化定数  $\mathcal{N}$  に発散が起こっている。SU(2) の例では、これは  $\zeta \propto \theta = \pi/2$  で、 $z \rightarrow \infty$  となることに対応する。

上では行列に対して  $\cos, \sin$  などを特別に定義したが、文献ではしばしば「極分解」の形で示される。極分解を正方でない行列  $Z$  に拡張するには、 $R = \sqrt{Z^\dagger Z}$  あるいは  $S = \sqrt{Z Z^\dagger}$  を定義し、これが特異性を持たないと仮定して、ユニタリ行列の代わりに  $P = ZR^{-1}$  あるいは、 $Q = S^{-1}Z$  として、 $Z = PR = SQ$  のように分解する。 $R, S$  が逆を持たない場合は不可。

<sup>15</sup>D.J.Thouless, NP21(1960)225.

## ◎粒子対演算子を含む場合

対相関を考える場合には粒子数を変化する対演算子を含む代数を考える。 $n$  個の一粒子状態がある場合、

$$\{c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger, c_\alpha^\dagger c_\beta, c_\alpha c_\beta\} \quad (\text{G.117})$$

の  $2n^2 - n$  個の演算子の代数は、 $SO(2n)$  を生成する。<sup>16</sup> この場合は  $\{c_\alpha^\dagger c_\beta\}$  が  $SU(n)$  の代数を作るので、商空間  $SO(2n)/U(n)$  上で G C S が定義される。

$$|\zeta\rangle = \exp(\sum \zeta_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger - \text{h.c.})|0\rangle \quad (\text{G.118})$$

一粒子演算子の変換、Thouless 型との関係、等は粒子空孔対の場合と同様に実行できる。

---

16

- Zhang et al., 前掲.
- S.Nishiyama, PTP55(1976)1146.



TABLE I

Generalized coherent states and their invariant integration measures which appear in nuclear many-body problems

Example	Boson system	Spin system	Many-fermion system (number conserving)	Many-fermion system (with pairing)
Generators of the algebra	bosons	spins	particle-hole pairs	fermion pairs
$A_\mu^\dagger$ $B_i$	$b^\dagger$ —	$J_x = J_x + iJ_y$ $J + J_z$	$\begin{cases} a_p^\dagger b_h^\dagger \\ a_p^\dagger a_p, b_h^\dagger b_h \end{cases}$ $\begin{cases} p = 1, \dots, m \\ h = 1, \dots, n \end{cases}$	$\begin{cases} a_i^\dagger a_j^\dagger & (i \neq j) \\ a_i^\dagger a_j \end{cases}$ $\begin{cases} i, j = 1, \dots, n \end{cases}$
$ 0\rangle$	boson vacuum	lowest $J_z$ state	particle-hole vacuum	fermion vacuum
Quantum number	—	magnitude of spin $J$	fermion number	number of single-particle orbits
GCS	boson coherent state	SU(2) coherent state	determinant	determinant
Manifold G/H	$W_1/T_1$	SU(2)/U(1)	$U(m+n)/[U(m) \times U(n)]$	$SO(2n)/U(n)$
Parameter $Z$	complex number	complex number	$Z = \{Z_{pn}\}$ : complex $m \times n$ matrix	$Z = \{Z_{ij}\}$ : skew symmetric complex $n \times n$ matrix
Norm function $\mathcal{N}_Z = (Z Z)$	$\exp(Z^*Z)$	$(1 + Z^*Z)^{2J}$	$\det(I + Z^\dagger Z)$	$[\det(I + Z^\dagger Z)]^{1/2}$
Metric function $g_{\mu\nu}(Z^*, Z)$	1	$2J/(1 + Z^*Z)^2$	$(I + ZZ^\dagger)^{-1} \otimes (I + Z^\dagger Z)^{-1}$	$(I + ZZ^\dagger)^{-1} \otimes (I + Z^\dagger Z)^{-1}$
Weight function $\rho(Z^*, Z)$	$1/\pi$	$\frac{2J+1}{\pi} (1 + Z^*Z)^2$	$n_0 [\det(I + Z^\dagger Z)]^{-(m+n)}$	$n_0 [\det(I + Z^\dagger Z)]^{-(n-1)}$

The upper seven rows give a characterization of the GCS. The fourth row denotes the quantum number fixed by  $|0\rangle$  which specifies the irreducible representation. The sixth and the seventh rows describe the structure of the parameter space ( $W_1$  denotes the Heisenberg-Weyl group and  $T_1$  merely a phase factor). On the last three rows are given the functions  $\mathcal{N}_Z$ ,  $g_{\mu\nu}$  and  $\rho$  of  $Z^*$ ,  $Z$  which play an important role in the classical dynamics discussed in sect. 3.

## G.4 一般論

### G.4.1 一般化の筋書き

通常のコヒーレント状態の一般化の可能性

- i) 消滅演算子の固有状態
- ii) 最小不確定性
- iii) リー群の表現

このうち、最も使われるのは iii) のケースで、スピン・コヒーレント状態はその具体例。ただし、iii) のうちでも、どこまで定義を広げるかによって種々の流儀がある。

- 系を記述する演算子のセット  $\{T_i\}$  が交換子に関して閉じたリー代数  $L$  を作るとする (同じ添え字については和をとる) :<sup>17</sup>

$$[T_i, T_j] = c_{ij}^k T_k \quad (T_i, j, k \in L) \quad (\text{G.120})$$

- 対応する群  $G$  のユニタリ既約表現に属する状態 (多くの場合最大ウェイトの状態) を基準の状態  $|0\rangle$  として選ぶ。
- 基準状態を (位相因子を除き) 不変にする元  $h$  全体の集合は  $G$  の部分群  $H$  をつくる :

$$h|0\rangle = e^{i\phi(h)}|0\rangle \quad (h \in H) \quad (\text{G.121})$$

このとき、商空間  $G/H$  は等質空間となる。

- $G$  の元  $g$  は  $H$  の元  $h$  と  $G/H$  の元  $\xi$  の積であらわされる :

$$g = \xi h \quad (g \in G, h \in H, \xi \in G/H) \quad (\text{G.122})$$

- 一般コヒーレント状態は、等質空間  $G/H$  の代表元により、

$$|\xi\rangle = \xi|0\rangle \quad (g|0\rangle = |\xi\rangle e^{i\varphi(h)}) \quad (\text{G.123})$$

のようにあらわされる。

- 「1の分解」

$$\hat{I} \equiv \int d\mu(\xi) |\xi\rangle \langle \xi| \quad (\text{G.124})$$

を定義すると、この演算子は任意の元  $g \in G$  と交換することが示される。従って、適当な規格化定数により、この表現空間内で  $\hat{I} = 1$  となる。

この問題設定に基づいて、上のボソンCS、スピンCSにおける計算を一般のGCSに拡張することができる。<sup>18</sup> 以下では、フェルミ系における対演算子に基づくGCSを念頭において、一般論を具体的に示す。

<sup>17</sup>この代数が「半単純」であるときは、カルタン基底  $\{H_i, E_\alpha, E_{-\alpha}\}$  により、群の表現論が展開される。

$$[H_i, H_j] = 0, \quad [H_i, E_\alpha] = \alpha_i E_\alpha, \quad [E_\alpha, E_{-\alpha}] = \alpha_i H_i, \quad [E_\alpha, E_\beta] = N_{\alpha\beta} E_{\alpha+\beta} \quad (\text{G.119})$$

<sup>18</sup>前掲の Perelomov の教科書、Zhang 達のレビューなどいろいろな報告がある。

### G.4.2 GCSの具体的構成

フェルミ粒子系など量子力学多体系を扱う際にあらわれる代数は、

$$\{S_+, S_-, S_0\}, \quad \{c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger, c_\alpha c_\beta, c_\alpha^\dagger c_\beta\}, \quad \text{etc.}$$

など、生成消滅演算子対によるもの ( $\Leftrightarrow$  1 体型演算子) が多い (多体演算子は代数的に閉じない場合が多い)。そこで、原子核多体問題への具体的応用を考えて、次のように問題を設定：

代数を構成する演算子および基準状態は次の条件を満たすと仮定：<sup>19</sup>

- i) 演算子  $A_\mu, A_\mu^\dagger, B_i \sim [A, A^\dagger]$  は閉じた代数を構成する。 $A^\dagger$  は互いに可換 ( $[A^\dagger, A^\dagger] = 0$ ) であり、また、 $B$  はその中の閉じた部分代数を構成する： $[B, B] \sim B$ 。
- ii) 基準状態  $|0\rangle$  はこの代数のユニタリ既約表現の最大 (または最小) ウェイトのベクトルであり、 $A|0\rangle = 0$  および  $B|0\rangle \propto |0\rangle$  をみたす。
- iii) 上の条件のもとで構成されたGCSのノルムは特異性をもたない。

#### ◎種々の定義

- GCS (規格化されていない)。

$$|z\rangle = \exp(z_\mu A_\mu^\dagger) |0\rangle \quad z \text{ は複素数} \quad (\text{G.125})$$

- 規格化されたGCSおよびノルム関数

$$|z\rangle = \mathcal{N}^{-1/2} |z\rangle, \quad \mathcal{N}(z^*, z) = \langle z|z\rangle \quad (\text{G.126})$$

この状態は、 $z, z^*$  の両者に依存する。この状態は、ユニタリ形で書くことも可能だが、以下では利用しない。

- 「1」の分解

$$\hat{I} \equiv \int d\mu_z |z\rangle \langle z| = 1, \quad d\mu_z = \rho(z^*, z) d^2 z = \rho \prod_\mu d\text{Re}z_\mu d\text{Im}z_\mu \quad (\text{G.127})$$

- GCSパラメタ空間 (等質空間) の計量

$$g_{\mu\nu}(z^*, z) = \partial_\mu^* \partial_\nu \ln \mathcal{N}(z^*, z) \quad (\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial z_\mu}, \partial_\mu^* = \frac{\partial}{\partial z_\mu^*}) \quad (\text{G.128})$$

- 不変測度の重み関数

$$\rho(z^*, z) = \mathcal{V}^{-1} \det[g_{\mu\nu}], \quad \mathcal{V} = \int d^2 z \det[g_{\mu\nu}] / \mathcal{N}(z^*, z) \quad (\text{G.129})$$

<sup>19</sup>物理での通常の記法にしたがい、エルミット共役は ( $\dagger$ )、複素共役は ( $*$ ) であらわす。なお、繰り返された添字については和をとるものとする。

### G.4.3 不変測度の証明

ここでは、演算子の GCS の群構造が明確でない場合のことも考えて、直接に不変測度の証明を行う。(ただし、Schur 補題を仮定するので、既約表現であることを前提。) 具体的に代数を次の形にあらわす：

$$[A_\mu^\dagger, A_\nu^\dagger] = 0 = [A_\mu, A_\nu], \quad (\text{G.130})$$

$$[A_\mu, A_\nu^\dagger] = p_{\mu\nu} + q_{\mu\nu i} B_i, \quad (\text{G.131})$$

$$[B_i, A_\mu^\dagger] = r_{i\mu\nu} A_\nu^\dagger, \quad [B_i, A_\mu] = s_{i\mu\nu}^* A_\nu, \quad (\text{G.132})$$

$$[B_i, B_j] = t_{ijk} B_k \quad (\text{G.133})$$

ここで、 $\{B_i\}$  と  $\{B_i^\dagger\}$  は線型に関係している。係数  $q, r, s, t$  はいくつかの拘束条件を満たすが以下では必要ない。また定数  $p_{\mu\nu}$  は、基準状態の条件

$$A_\mu|0\rangle = 0 = B_i|0\rangle \quad (\text{G.134})$$

の第二の等式を満たすように決めておく。

GCS への演算は、

$$A_\mu^\dagger|z\rangle = \partial_\mu|z\rangle, \quad A_\mu|z\rangle = (p_{\mu\nu} z_\nu + D_\mu)|z\rangle, \quad (\text{G.135})$$

$$B_i|z\rangle = D_i|z\rangle, \quad B_i^\dagger|z\rangle = -\tilde{D}_i|z\rangle \quad (\text{G.136})$$

ただし、

$$D_\mu = C_{\mu\nu} \partial_\nu, \quad \frac{1}{2} C_{\mu\nu} = q_{\mu\lambda i} r_{i\kappa\nu} z_\lambda z_\kappa, \quad (\text{G.137})$$

$$D_i = r_{i\mu\nu} z_\mu \partial_\nu, \quad \tilde{D}_i = s_{i\mu\nu} z_\mu \partial_\nu \quad (\text{G.138})$$

で定義する。

式 (G.136) に  $|z\rangle$  を作用すると、関係式

$$\partial_\mu^* \mathcal{N} = (p_{\mu\nu} z_\nu + D_\mu) \mathcal{N}, \quad (D_i + \tilde{D}_i^*) \mathcal{N} = 0 \quad (\text{G.139})$$

が導かれる。

ここで、「1」の分解の左辺の積分  $\hat{I}$  と  $A^\dagger, B$  の交換関係がゼロであれば、Schur 補題により、 $\hat{I}$  がこの既約表現の内部で 1 に等しい。この証明のために、重み関数 (G.129) に対する行列の関係式を用いる。 $\rho$  の成分  $g_{\mu\nu}$  に対する行列の余因子を  $\Delta_{\mu\nu}$  とおくと、次の公式が成立する：

$$g_{\mu\nu} \Delta_{\mu\lambda} = \delta_{\nu\lambda} \rho = g_{\nu\mu} \Delta_{\lambda\mu} \quad (\text{G.140})$$

および、

$$\partial_\lambda \rho = \Delta_{\mu\nu} \partial_\lambda g_{\mu\nu} \quad (\text{G.141})$$

まず、 $A$  と  $\hat{I}$  の交換子は、部分積分を行なって：

$$[A_\mu, \hat{I}] = \int d^2 z P_\mu(z) |z\rangle, \quad P_\mu(z^*, z) = \{p_{\mu\nu} z_\nu + \partial_\mu^* - D_\mu - \partial_\nu(C_{\mu\nu})\}(\rho/\mathcal{N}), \quad (\text{G.142})$$

とあらわせる。<sup>20</sup> 条件式 (G.139) の第一式は

$$p_{\mu\nu}z_\nu = (\partial_\mu^* - D_\mu) \ln \mathcal{N} \quad (\text{G.143})$$

とあらわせるので、

$$P_\mu = \frac{1}{\mathcal{N}} \{ \partial_\mu^* - D_\mu - \partial_\nu(C_{\mu\nu}) \} \quad (\text{G.144})$$

である。一方 (G.143) 式に  $\partial_\lambda^* \partial_\nu$  を作用し、 $g$  の定義を入れると

$$0 = \partial_\mu^* g_{\lambda\nu} - C_{\mu\kappa} \partial_\kappa g_{\lambda\nu} - (\partial_\nu C_{\mu\kappa}) g_{\lambda\kappa} \quad (\text{G.145})$$

が得られる。これに  $\Delta_{\lambda\nu}$  をかけて  $\lambda, \nu$  和をとり、(G.140) 式を利用すると

$$0 = \{ \partial_\mu^* - D_\nu - \partial_\nu(C_{\mu\nu}) \} \rho \quad (\text{G.146})$$

が得られ、 $[A_\mu, \hat{I}] = 0$  が導かれる。

次に  $B_i$  と  $\hat{I}$  の交換子の計算：

$$[B_i, \hat{I}] = \int d^2 z Q_i |z\rangle \langle z|, \quad Q_i(z^*, z) = -(D_i + r_{i\mu\mu} + \tilde{D}_i^* + s_{i\mu\mu}^*) (\rho / \mathcal{N}) \quad (\text{G.147})$$

条件式 (G.139) の第二式より、

$$(D_i + \tilde{D}_i^*) \ln \mathcal{N} = \frac{1}{\mathcal{N}} (D_i + \tilde{D}_i^*) \mathcal{N} = 0 \quad (\text{G.148})$$

この両辺に  $\partial_\mu^* \partial_\nu$  を作用すると、

$$0 = \partial_\mu^* \partial_\nu (D_i + \tilde{D}_i^*) \ln \mathcal{N} = (D_i + \tilde{D}_i^*) g_{\mu\nu} + r_{i\nu\lambda} g_{\mu\lambda} + s_{i\mu\lambda}^* g_{\lambda\nu} \quad (\text{G.149})$$

が導かれる。これに  $\Delta_{\mu\nu}$  を作用すると、(G.140) を用いて

$$0 = (D_i + \tilde{D}_i^* + r_{i\mu\mu} + s_{i\mu\mu}^*) \rho \quad (\text{G.150})$$

この関係式と (G.139) の第二式より、 $Q_i = 0$  が導かれ、従って  $[B_i, \hat{I}] = 0$ 。

#### G.4.4 GCSに基づく経路積分と古典力学

GCSは系の状態をある複素パラメタ空間上であらわす。具体例からわかるように、ここには、時間反転に対する正及び負の成分が含まれているため、一般的な時間依存ダイナミックスを記述し得る形式になっている。

GCSに基づくダイナミックスを記述するため、まず系の伝播関数に対する経路積分表示を導く：

$$K(z_f, z_i; t) = \langle z_f | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | z_i \rangle \quad (\text{G.151})$$

前のように、時間を  $n$  当分し、GCSの完全性関係を挿入することにより、

$$K = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_k d\mu(z_k) \prod_k \langle z_{k+1} | (1 - \frac{i}{\hbar} H \epsilon) | z_k \rangle \quad (\text{G.152})$$

<sup>20</sup>必要なら  $\hat{I}$  の行列要素をとって、境界からの寄与がゼロになることを具体的に示す。

ここで、 $z$  の添字  $\mu$  は省略。計算は前と同様で、結果は

$$K = \int \mathcal{D}\mu(z) e^{\frac{i}{\hbar} S[z]}, \quad S[z(\cdot)] = \int_0^t ds \langle z(s) | i\hbar \partial_s - H | z(s) \rangle \quad (\text{G.153})$$

で与えられる。径路  $z$  の境界条件は

$$s(0) = z_i, \quad z(t) = z_f \quad (\text{G.154})$$

フェルミ系の場合に見たように、GCS はスレーター行列に対応するため、この空間での時間的径路を定める変分原理

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L} dt = 0, \quad \mathcal{L} = \langle z(t) | i\hbar \partial_t - H | z(t) \rangle \quad (\text{G.155})$$

はTDHFを与える。また、定常的な場合

$$\delta \langle z(t) | H | z(t) \rangle = \delta \langle z | H | z \rangle / \langle Z | z \rangle = 0 \quad (\text{G.156})$$

は平均場近似の方程式を与える。

式 (G.155) は、GCS の完全性関係 (1 の分解) を利用して時間発展演算子を径路積分形にあらわし、定常位相近似 (SPA: Stationary Phase Approximation) を行うことによって導かれる。ラグランジアン  $\mathcal{L}$  を具体的に書くと

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} i\hbar (\dot{z}_\mu \partial_\mu - \dot{z}_\mu^* \partial_\mu^*) \ln \mathcal{N} - \mathcal{H}(z^*, z), \quad \mathcal{H} = \langle z | H | z \rangle \quad (\text{G.157})$$

ここで変分原理を適用すると、方程式

$$i\hbar g_{\mu\nu} \dot{z}_\nu = \partial_\mu^* \mathcal{H} \quad (\text{G.158})$$

がえられる。ここであらわれる関数  $g$  は前と同じくパラメタ空間の計量であり、

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dz_\mu^* dz_\nu, \quad g_{\mu\nu} = \partial_\mu^* \partial_\nu \ln \mathcal{N} \quad (\text{G.159})$$

で定義される。

TDHF 方程式 (G.158) は、次のように、古典力学に特徴的な条件を満たしている：

- i)  $\text{Re}z, \text{Im}z$  の結合した一階の時間微分方程式であり、初期条件として、複素パラメタをある時刻で与えることにより、解が一意的に定まる。
- ii) 任意の  $z, z^*$  の関数  $\mathcal{F}, \mathcal{G}$  にたいして、ポアソン括弧を

$$[\mathcal{F}, \mathcal{G}]_{PB} = -\frac{i}{\hbar} (g^{-1})_{\mu\nu} (\partial_\mu \mathcal{F} \partial_\nu^* \mathcal{G} - \partial_\mu \mathcal{G} \partial_\nu^* \mathcal{F}) \quad (\text{G.160})$$

で定義すれば、これは反対称で Jacobi 恒等式を満たす。運動方程式は

$$\frac{d}{dt} \mathcal{F} = [\mathcal{F}, \mathcal{H}]_{PB} + \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{F} \quad (\text{G.161})$$

で与えられる。<sup>21</sup>

<sup>21</sup>これを平坦な空間の中の超曲面に制限された力学と考え、Dirac の Constrained Hamiltonian Dynamics と関連づけることも可能。

- iii)  $\mathcal{F}$  として、演算子  $F$  の Q シンボル (共変シンボル)  $\langle z|F|z\rangle$  を用いるとき、 $F$  がリー代数の元 ( $A^\dagger, A, B$  の一次結合、すなわち一体演算子) であれば、任意の演算子  $G$  に対し、

$$[\mathcal{F}, \mathcal{G}]_{PB} = -\frac{i}{\hbar} \langle z|[F, G]|z\rangle \quad (\text{G.162})$$

が成立する。

- iv) ii) と iii) より、ハミルトニアンと交換する一体演算子 (保存量)  $Q$  があれば、対応する古典量  $\mathcal{Q}(z^*, z) = \langle z|Q|z\rangle$  も古典的に保存される :

$$\frac{d}{dt} \mathcal{Q} = [\mathcal{Q}, \mathcal{H}]_{PB} = 0 \quad (\text{G.163})$$

とくに、古典的エネルギー  $\mathcal{H}$  も運動方程式を満たす古典的径路に沿って保存される。

- vi) 変分原理によって定まった古典的作用積分は、古典径路  $z(t)$  および古典エネルギー  $E_{cl} = \mathcal{H}(z^*, z)$  を用いて

$$S_{cl} = \int_0^t \omega - E_{cl} t \quad (\text{G.164})$$

とあらわせる。ここで  $\omega$  は一次微分形式

$$\omega = \frac{i\hbar}{2} (\partial_\mu \ln \mathcal{N} dz_\mu - \partial_\mu^* \ln \mathcal{N} dz_\mu^*) \quad (\text{G.165})$$

であり、その外微分

$$d\omega = -i\hbar g_{\mu\nu} dz_\mu^* \wedge dz_\nu \quad (\text{G.166})$$

が古典的位相空間の構造を決定する。

- vi) Liouville の定理。古典的位相空間での体積要素

$$\Delta\mu(z) = \rho(z^*, z) \prod_\mu \Delta z_\mu^* \Delta z_\mu \quad (\text{G.167})$$

は古典的径路に沿って保存される。

- vii) 半古典量子化。位相空間の構造 (G.165) から、この古典的構造に基づく量子論的定常状態の半古典量子化条件 (Bohr-Sommerfeld) が得られる :

$$\oint \omega = 2\pi n \hbar \quad (\text{G.168})$$

ここで積分は周期軌道に対して実行される。多重周期系に対しては、この条件は EBK (Einstein-Brillouin-Keller) 量子条件に置き換えられる。このとき、積分は位相空間内の軌道が乗ったトーラス上の独立なループ毎に設定される。

### G.4.5 半古典伝播関数

定常位相近似 (SPA) で導かれた古典軌道の情報は、半古典論によって量子論に埋め込まれる。通常の座標空間での経路積分では、積分される軌道の古典軌道からのずれを二次まで取り込むことにより、半古典的な伝播関数を導く。この効果は、伝播関数に対する各古典軌道の寄与の重み付き重ね合わせを与える。<sup>22</sup>

この節では、ずれの積分を実行せず、むしろ量子論的な時間発展演算子  $U(t)$  が満たす条件を近似的に再現するように、半古典論的時間発展演算子を定義する。ハミルトニアン  $H$  に対し、時間発展演算子は

$$U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right) \quad (\text{G.169})$$

で与えられる。 $U(t)$  が満たす条件は

$$\hat{\Lambda}U(t) \equiv (i\hbar\partial_t - H)\hat{\Lambda} = 0, \quad \hat{\Lambda}(t=0) = 1 \quad (\text{G.170})$$

伝播関数を GCS 表示であらわせば、

$$U(t) = \int d\mu(z_f)d\mu(z_i)|z_f\rangle K(z_f, z_i; t) \langle z_i| \quad (\text{G.171})$$

であり、 $K$  は上で扱った伝播関数。SPA では、各 GCS の初期値  $z_i$  に対して  $z_f$  が一意的に定まる。このため、上記の積分で古典軌道が寄与する部分を抜き出したものを半古典な時間発展演算子

$$\tilde{U}(t) = n(t) \int d\mu[z] e^{\frac{i}{\hbar}S[z]} |z(t)\rangle \langle z(0)| \quad (\text{G.172})$$

ここで、 $n$  は  $n(t=0) = 1$  となる規格化定数であり、具体的な問題に対応して定める。積分はある時刻  $s$  における古典径路の位置  $z(s)$  に対して行われる。例えば  $s=0$  とすれば、これは、始点  $z(0)$  を動かして得られる全ての古典軌道上の積分を意味する。積分測度は不変であるので、この時刻はどこにとっても構わない。この演算子を用ると、 $t=0$  で与えられた初期条件  $\Psi_0$  に対する時刻  $t$  での半古典論波動関数が

$$\tilde{\Psi}(t) = \tilde{U}(t)\psi_0 \quad (\text{G.173})$$

のように与えられる。これが時間発展演算子であるためには、運動方程式 (G.170) を満たす必要がある。このために、 $\tilde{U}$  の時間微分を計算すると

$$\hat{\Lambda}\tilde{U}(t) \int d\mu[z] \{i\hbar\dot{z}\hat{P} + n\hat{Q}\hat{\Lambda}\} |z(t)\rangle e^{\frac{i}{\hbar}S} \langle z(0)| \quad (\text{G.174})$$

ただし、

$$\hat{P} = |z(t)\rangle \langle z(t)|, \quad \hat{Q} = 1 - \hat{P} \quad (\text{G.175})$$

とくに、ハミルトニアンが一体演算子（リー群の生成子の一次結合）であれば、

$$\hat{\Lambda}|z\rangle = \hat{P}\hat{\Lambda}|z\rangle \quad (\text{G.176})$$

<sup>22</sup>ここでの扱いは、伝播関数の経路積分表示において、古典軌道からの作用積分への寄与をそのまま残し、同時に古典軌道についての積分を実行することに対応する。これに対し、Klauder 達は、複素位相空間において古典径路を決め、それに基づいて半古典論的伝播関数を考察した (J.R.Klauder, PRD19(1979)2349)。古典軌道からの揺らぎの効果についてもさまざまな検討がなされ、とくにカオス的な軌道の研究で「位相空間火面 (caustic)」が存在することが示された (Adachi, Ann.Phys. Ann.Phys.195(1989)45)。



が成立する。このとき、単に  $n(t) = 1$  とおいておけば、 $\tilde{U}$  は運動方程式を満たす。このため、次の結果が得られる：<sup>23</sup>

「一体ハミルトニアンに対しては、 $n = 1$  とした  $\tilde{U}$  が正確な解を与える」

ハミルトニアンが一体演算子でない場合には、この条件が必ずしも成立せず、 $\tilde{U}$  が運動方程式を満たす保証はない。この点は、GCSが一体演算子により生成されることに関係していると思われる。<sup>24</sup>

◎半古典論的時間発展演算子の性質：

i) 初期条件： $\tilde{U}(0) = 1$

ii) ゲージ独立性。GCSに（一般に時間に依存する）位相を導入しても  $\tilde{U}$  は不変。実際、 $|z(t)\rangle \rightarrow e^{i\alpha(t)}|z(t)\rangle$  に対し、作用関数は

$$S \rightarrow \int_0^t ds [\langle z(s) | \hat{\Lambda} | z(s) \rangle - \hbar \dot{\alpha}] = S - \hbar [\alpha(t) - \alpha(0)] \quad (\text{G.179})$$

となるが、余分な第二項は、 $\tilde{U}$  のブラケットからの寄与でキャンセル。

iii) 時間並進不変性。

iv) エルミット共役： $\tilde{U}(t)^\dagger = \tilde{U}(-t)$ 。

v) 時間反転対称性。ハミルトニアンがエルミットでそのQシンボル  $\mathcal{H}$  が実であれば、 $\tilde{U}(-t) = \tilde{U}^*$  が成立する。これは、古典方程式（TDHF）の解が時間反転解  $\bar{z}(t) \equiv z(-t)^*$  をもち、この解に対する作用関数が  $S[\bar{z}] = -S[z]$  となることから示される。

vi) Reproducing relation： $\tilde{U}$  の積に対して、SPAの範囲で

$$\tilde{U}(t)\tilde{U}(s) \simeq \tilde{U}(t+s) \quad (\text{SPA}) \quad (\text{G.180})$$

実際に  $\tilde{U}$  の積をつくると、そこに二つの古典軌道に対応する内積  $\langle z'|z \rangle$  が現れる。この内積は、中間に完全性関係を入れて

$$\int d\mu(z'') \langle z'|z'' \rangle \langle z''|z \rangle \quad (\text{G.181})$$

<sup>23</sup>TDHFが一体近似であることを考えれば、この結果は自然。時間発展演算子の形で古典経路についての積分を実行すれば、スレーター行列に限らず任意の初期状態に対しても、波動関数が古典径路を用いてあらわされることになる。(G.176)式は、ハミルトニアンが時間依存であり、エルミット性がない場合にも成立する。証明は「G.6 補足」に与える。

<sup>24</sup>解析的に解くことができる模型では、例えばSU(2)によるハミルトニアン

$$H = 2\mu J_0 - (\lambda J_+ + \lambda^* J_-) \quad (\text{G.177})$$

を考えた場合、スピンCSに基づく半古典な時間発展演算子  $\tilde{U}(t)$  は  $n = 1$  として、正確な解に一致することが具体的に示される。一方、ボソン系で

$$H = \frac{1}{2}\epsilon(b^\dagger b + bb^\dagger) + \frac{1}{2}v(b^\dagger b^\dagger + bb) \quad (\text{G.178})$$

を考えると、これは(SU(1,1)CSを考えれば一体演算子の結合だが)ボソンCSの生成子に対して線型ではない。この場合にも  $n(t)$  として時間依存の関数を用いることによって  $\tilde{U}$  が正確な解を再現することが示される。(T.Suzuki, NPA398(83)557)。

とし、SPAを仮定すると、時刻  $s$  で古典軌道をスムーズにつなぐ条件  $z' = z$  を与える。

vii) ユニタリ性。vii) の条件に、iv) のエルミット性の条件を考慮すれば、

$$\tilde{U}(t)^\dagger \tilde{U}(t) \simeq 1 \quad (SPA) \quad (G.182)$$

これらは、量子力学の時間発展演算子  $U(t)$  が正確に満たす条件であり、 $\tilde{U}(t)$  も（一部はSPA近似のもとで）満たすことを示している。

#### G.4.6 可積分系の半古典量子化

上の半古典近似の結果を定常状態の量子化の問題に適用する。系のGCSをあらわすパラメタを  $z$  とすると、半古典波動関数  $\tilde{\Psi}(t)$  の時間発展をGCS表示であらわすと、

$$|\tilde{\Psi}(t)\rangle = \int d\mu[z] |z(t)\rangle \langle z(0)| \tilde{\Psi}(0)\rangle e^{\frac{i}{\hbar} S[z]} \quad (G.183)$$

で与えられる。ここで、作用積分は

$$S[z] = \mathcal{I}[z] - E[z]t, \quad \mathcal{I}[z] = \int_{z(0)}^{z(t)} \omega = \int_{z(0)}^{z(t)} \frac{i\hbar}{2} (dz \partial \ln \mathcal{N} - dz^* \partial^* \ln \mathcal{N}) \quad (G.184)$$

である ( $E[z]$  は古典軌道  $z(t)$  に対応するエネルギー)。

いま系は可積分系で、古典軌道は不変トーラス上にあると仮定する。このとき、古典的 (多次元) 位相空間の変数  $z, z^*$  を作用変数・角変数であらわして前者からエネルギー変数を分離し、 $z(t) \leftrightarrow \{E, v, \theta(t)\}$  の変数変換を行なって、位相空間の体積要素は

$$d\mu(z) = \rho(z) dE dv d\theta \quad (G.185)$$

とあらわすことにしよう ( $v, \theta$  は一般に多変数をまとめてあらわす)。

定常状態を特徴づけるトーラスを  $E, v$  で指定したとき、古典径路  $z(t)$  は Einstein-Brillouin-Keller(EBK) 量子化条件

$$\oint_{L_i} \omega = 2\pi n_i \hbar \quad (G.186)$$

をトーラス上の独立なループ ( $L_i, i = 1, 2, \dots$ ) に対して行なって定められる。このとき、半古典波動関数は、時間依存の因子  $\exp(-iEt/\hbar)$  を除いて、量子化条件を満たすトーラス上の座標  $\{\theta\}$  に関する積分により、

$$|\tilde{\Psi}(t)\rangle = \int \rho d\theta |z(t)\rangle \langle z(0)| \tilde{\Psi}(0)\rangle \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_{z(0)}^{z(t)} \omega\right\} \quad (G.187)$$

を満たす。方程式 (G.187) は定常状態波動関数に対する積分方程式であり、その解は

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \int \rho(z) d\theta |z\rangle \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_{z_0}^z \omega\right\} \quad (G.188)$$

で与えられる。

## G.5 いくつかの応用

### G.5.1 $SU(2) \times SU(2)$ 模型における半古典量子化

具体的な応用例として、 $SU(2) \times SU(2)$  ( $\simeq SO(4)$ ) の対称性をもつ模型における半古典量子化を取り上げる。<sup>25</sup>

### G.5.2 非コンパクトな場合の例： $SU(1,1)$ の GCS

非コンパクト群の場合にも GCS を拡張することが行われている。ここでは  $SU(1,1)$  の例として、これをボソン系で実現した代数

$$K_+ = \frac{1}{2}b^\dagger b^\dagger, \quad K_- = (K_+)^\dagger, \quad K_0 = \frac{1}{2}(b^\dagger b + b b^\dagger) \quad (\text{G.189})$$

を考えると、スピノールに倣って議論できる。これはスクィーズド状態の議論に用いられる。<sup>26</sup>  $\epsilon$  を実数、 $\kappa$  を複素数として、次のハミルトニアンを考える。

$$H_s = \epsilon b^\dagger b + \frac{1}{2}(\kappa b^\dagger b^\dagger + \kappa^* b b) \quad (\text{G.190})$$

このハミルトニアンの固有値・固有状態を以下のようにして調べる。まず複素パラメタ  $\gamma$  に依存する次のユニタリ変換を考える。

$$V(\gamma) \equiv e^F \quad \text{但し } F \equiv \frac{1}{2}(\gamma b^\dagger b^\dagger - \gamma^* b b) \quad (\text{G.191})$$

ここで  $F$  は反エルミットとなることに注意。これを用いて

$$B^\dagger \equiv V(\gamma) b^\dagger V(\gamma)^{-1} \quad (\text{G.192})$$

を定義する。また  $\gamma = \xi e^{i\eta}$  のように実数  $\xi, \eta$  を定義しておく。

i)  $B^\dagger, B$  はボーズ粒子の生成消滅演算子となり、かつ

$$B = b \cosh \xi - b^\dagger e^{i\eta} \sinh \xi \quad (\text{G.193})$$

ii) 演算子  $B$  の真空を  $|0\rangle$  で表すとき、 $|0\rangle = V(\gamma)|0\rangle$  となる。

iii) 状態  $|0\rangle$  に対する条件  $B|0\rangle = 0$  を用いると

$$|0\rangle = \text{定数} \times e^{\frac{1}{2}\zeta b^\dagger b^\dagger} |0\rangle \quad (\text{G.194})$$

の形に表される。

iv) 複素数  $\gamma$  をハミルトニアンが簡単な形になるように選ぶと

$$H_s = \omega B^\dagger B + \frac{1}{2}(\omega - \epsilon), \quad \omega \equiv \sqrt{\epsilon^2 - \kappa^* \kappa} \quad (\text{G.195})$$

と求まる。但し、 $\epsilon < |\kappa|$  の場合は系は不安定。

<sup>25</sup>T.Suzuki & Y.Mizobuchi, PTP79(1988)480.

この模型に関しては京都グループの集団励起に関連する研究を参照。

<sup>26</sup> $SU(1,1)$  に関連する話題として、アフィン群に対する GCS としてのウェーブレットの研究。

v)  $\hat{x}, \hat{p}$  のスクウィーズド状態  $|n\rangle \equiv \frac{(B^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$  における期待値はゼロ。一方、そのゆらぎ  $\Delta x, \Delta p$  は

$$\left[ \left( n + \frac{1}{2} \right) (\epsilon \mp |\kappa| \cos \eta) / \omega \right]^{1/2} \quad (\text{G.196})$$

となり、 $\eta = 0, \pi$  で最小値  $n + \frac{1}{2} (\times \hbar)$  をとる。

### G.5.3 一次元散乱と転送行列

原子核など多体系の励起状態の強度の分散や準安定状態の崩壊などにおける散逸過程は、注目している自由度とその背景をなす多自由度系との相互作用によっている。話を散乱問題で考えると、いろいろなチャンネルの結合がこのような自由度の散逸に対応するとみなすことができる。この場合、S行列のユニタリ性が、全体として無矛盾な枠組みの保証を与えている。この条件を満たすためには、原理的にはS行列の全てのチャンネルを一挙に解く必要がある。これに対し、転送行列の方法においては、入射チャンネルからスタートして *multiplicative* に問題を解いていくことが可能であり、散逸プロセスの記述においても自然な解釈を与えると考えられる。

このような動機から、転送行列の方法による散乱問題の扱いを再検討する。<sup>27</sup>

まず一次元のポテンシャル散乱の再定式化を行なう。ポテンシャル  $V(x)$  は遠方でゼロになると仮定し、一次元軸を適当にブロックに分ける： $(-\infty, +\infty) = \{\Delta_0, \Delta_1, \dots, \Delta_N\}$ 。それぞれのブロックを十分小さいとして、この領域でのポテンシャルを定数で近似する。各ブロックで波動関数を右及び左への進行成分に分け、それぞれの振幅を  $A_j, B_j, (j = 0, \dots, N)$  とすると、 $j$  番目の領域での波動関数は

$$\psi(x) = A_j e^{ik_j x} + B_j e^{-ik_j x} \quad (\text{G.197})$$

ここで波数は

$$k_j = \sqrt{2m(E - V_j)} / \hbar \quad (\text{G.198})$$

であり、 $E < V_j$  の場合は  $\text{Im}k > 0$  の虚数とする。

振幅  $A, B$  を二成分のベクトルに書き、これにいくつかの因子を加えて次のベクトルを定義する。

$$\hat{u}_j \equiv e^{-\gamma_j \sigma_x} e^{ik_j b_j \sigma_z} \sqrt{k_j} u_j, \quad u_j = \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix}, \quad (\text{G.199})$$

ここで  $\sigma$  はパウリ行列であり、また便宜上スケールパラメタ  $\kappa$  を導入して

$$\gamma_j = \frac{1}{2} \ln(k_j / \kappa). \quad (\text{G.200})$$

とおいた。 $E < V_j$  のときは、 $\ln k_j$  の決まった分枝をとることにする。

シュレディンガー方程式を解くと、隣り合ったブロックの振幅同士は転送行列  $\mathcal{T}_j$  によって結びつくことになる。すなわち、

$$\hat{u}_{j-1} = \mathcal{T}_j \hat{u}_j \quad (\text{G.201})$$

<sup>27</sup>例えば、M.Ya.Azbel, Phys.Rev.B28(1983)4106.

ただし、

$$\mathcal{T}_j = e^{-\gamma_j \sigma_x} e^{-ik_j \Delta_j \sigma_z} e^{\gamma_j \sigma_x} = e^{-ik_j \Delta_j \hat{\sigma}_j}, \quad \hat{\sigma}_j = \cosh 2\gamma_j \sigma_z + i \sinh 2\gamma_j \sigma_y. \quad (\text{G.202})$$

これを用いると、任意のブロック間の振幅同士は

$$\hat{u}_j = \mathcal{T}_{j+1} \mathcal{T}_{j+2} \cdots \mathcal{T}_n \hat{u}_n \quad (\text{G.203})$$

として結びつく。  $N \rightarrow \infty, \Delta_j \rightarrow 0$  の極限をとることにより、次の関係が得られる：

$$\hat{u}(x_0) = \mathcal{T}(x_0, x) \hat{u}(x), \quad \mathcal{T}(x_0, x) \equiv \bar{\mathcal{P}} \exp[-i \int_{x_0}^x dy G(y)], \quad (\text{G.204})$$

ここで  $k(x)$  は局所運動量、 $\bar{\mathcal{P}}$  は経路順序積演算子で、

$$G(y) = k(y) \{ \cosh 2\gamma(y) \sigma_z + i \sinh 2\gamma(y) \sigma_y \} \quad (\text{G.205})$$

第二項のため、この行列はエルミットではない。これは、転送行列がユニタリではないことに対応。実ポテンシャルでの散乱における確率保存は

$$\mathcal{T}^\dagger \sigma_z \mathcal{T} = \frac{k(x)}{k(x_0)} \sigma_z \quad (\text{G.206})$$

という関係式で保証される。

ここで次の結果を用いる：

「系のハミルトニアンが、あるリー群に対応する一般コヒーレント状態 (GCS) の生成演算子の一次結合であらわされるとき、このハミルトニアンの GCS 表示から得られる古典軌道に基づく半古典的伝搬関数は exact になる」

いまの場合リー群は  $SU(2)$  であり、この GCS は  $S=1/2$  の表現におけるスピンコヒーレント状態になっている。ハミルトニアンに対応するのは  $G(x)$  であり、これは転送行列がユニタリでないためエルミットにならない。しかし、上の定理を拡張することにより、上記の経路順序積を古典解（次の変分式の解）であらわすことができる。

$$\delta F(z) = 0, \quad F(z(\cdot)) \equiv \int_{x_0}^x dy \langle z(y) | i \frac{d}{dy} + G(y) | z(y) \rangle \quad (\text{G.207})$$

この方程式はスピンコヒーレント状態における期待値を計算することにより

$$-i\kappa \frac{d}{dy} z(y) = \{k(y)^2 + \kappa^2\} z + \{k(y)^2 - \kappa^2\} \frac{1+z^2}{2}, \quad (\text{G.208})$$

$$k(y)^2 = 2m(E - V(y))/\hbar^2 \quad (\text{G.209})$$

となる。これは、適当な変数変換をすると、元のシュレーディンガー方程式をパラメタ  $\kappa$  でスケールしたものになっている。この方程式は、可積分系に対する超対称性を利用した 'Related Operator' の方法によって得られる方程式にも対応している。<sup>28</sup>

この定式化によれば、次元散乱問題をある関数  $z(y)$  の非線形一次微分方程式で置き換えることになる。一般にいくつかのチャンネルがある場合には上の二成分の式を多成分の式で置き換えることになり、 $G(y)$  はより大きい行列になるが、経路順序積が実行できることは同様である。この定式化によれば、局所的なランダム力があるような模型<sup>29</sup> では、関数  $G(y)$  に局所的な付加項を加えることによって処理でき、各点での転送行列への影響を直接に見ることができる。

<sup>28</sup>J.F.Cariñena et al., Int.J.Mod.Phys.A13(1998)4913.

<sup>29</sup>A.Bulgac et al., Ann.Phys.242(1995)1.

## G.6 補足

G.4.5 節で述べた、半古典伝播関数が一体ハミルトニアンに対して正確な解を与えることを示す。

◎問題設定

- 半古典伝播関数 ( $\hbar = 1$ )

$$\tilde{U}(t, t') = \int d\mu[z_c] e^{iS[z_c]} |z_c(t)\rangle \langle z_c(t')| \quad (\text{G.210})$$

規格化定数  $n = 1$  とおいた。

- 作用関数

$$S[z] = \int_{t'}^t ds \langle z(s) | \Lambda(s) | z(s) \rangle, \quad \Lambda(t) \equiv i\partial_t - H(t) \quad (\text{G.211})$$

- 古典軌道  $z_c(t)$  が満たす方程式

$$ig_{\mu\nu}\dot{z}_\nu = \partial_\mu^* \mathcal{H}(t), \quad \mathcal{H}(t) = \langle z(t) | H | z(t) \rangle \quad (\text{G.212})$$

- 一体ハミルトニアン：GCS のリー代数の元（代数の生成子に関して一次）になっている。このとき、規格化されていない GCS に対しては

$$H(t)|z\rangle = \{h_0(z, t) + h_{1\mu}(z, t)\partial_\mu\}|z\rangle \quad (\text{G.213})$$

の形になる。（ $H$  は一般に時間依存としておく。）

- 証明すべき式

$$\Lambda(t)\tilde{U}(t, t') = 0 \quad (\text{G.214})$$

◎証明

$\Lambda$  を演算すると

$$\Lambda(t)\tilde{U} = \int d\mu e^{iS} \{-\langle z(t) | \Lambda(t) | z(t) \rangle + \Lambda(t)\} |z(t)\rangle \langle z(t')| \quad (\text{G.215})$$

$\Lambda$  の規格化された GCS への作用は ( $t$  は略記)

$$\Lambda|z\rangle = \mathcal{N}^{-1/2} \{i\dot{z}_\mu \partial_\mu - \frac{1}{2}i2(\dot{z}_\mu \partial_\mu + \dot{z}_\mu^* \partial_\mu^*) \ln \mathcal{N} - H\}|z\rangle \quad (\text{G.216})$$

古典軌道が満たす方程式は

$$i\dot{z}_\mu = h_{1\mu}(z) \quad \leftarrow \mathcal{H} = h_0(z) + h_{1\mu}(z)\partial_\mu \ln \mathcal{N}(z^*, z) \quad (\text{G.217})$$

これは  $h_{0,1}$  が  $z$  の正則関数であるため。これを (G.216) 式に代入すると

$$\Lambda|z\rangle = \mathcal{N}^{-1/2} \left\{ -\frac{1}{2}i2(\dot{z}_\mu \partial_\mu + \dot{z}_\mu^* \partial_\mu^*) \ln \mathcal{N} - h_0(z) \right\} |z\rangle \quad (\text{G.218})$$

右辺にかかる因子は単なる  $z(t)$  の関数であるため、(G.215) 式の右辺 = 0 となる。以上の証明ではハミルトニアンのエルミット性を用いていない（例： $z_c^*$  の満たす方程式）ため、エルミット性がない場合にも成立。

## P. 対相関の扱いと自由度の分離

粒子間の対相関は、とりわけフェルミ粒子多体系において、相転移を含め、非常に多様な現象を示す。この中でも角運動量（スピン）についてシングレットの対相関は代数的に閉じており、これを利用した解ける模型も歴史的に数多く構築されてきた。ここでは、代数的方法の例として、粒子間の対自由度を他の自由度から分離するマッピングの方法を紹介。この方法の幾つかの応用例も示す。<sup>30</sup>

### P.1 フェルミ対自由度と内部自由度

#### P.1.1 準スピンと量子数

まず、縮退した一準位模型で対相関の代数的構造を議論する。角運動量  $j$  で、磁気量子数  $\mu = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots, \pm j$  の一粒子状態におけるフェルミ粒子の生成消滅演算子：

$$c_{\mu}^{\dagger}, c_{\mu} \quad [c_{\nu}, c_{\mu}^{\dagger}] = \delta_{\mu\nu} \quad (\text{P.1})$$

時間反転状態は、位相をつけて、 $\tilde{\mu} = (-)^{j-\mu}\bar{\mu}$  のようにあらわす：

$$c_{\tilde{\mu}} \equiv (-)^{j-\mu} c_{\bar{\mu}} \quad (\text{P.2})$$

対演算子の組（和は  $\mu$  の正負全体にわたる）：

$$S_{+} = \frac{1}{2} \sum_{\mu} c_{\mu}^{\dagger} c_{\tilde{\mu}}^{\dagger}, \quad S_{-} \equiv (S_{+})^{\dagger}, \quad S_0 = \frac{1}{2} [S_{+}, S_{-}] = \frac{1}{2} (\hat{n} - D) \quad (\text{P.3})$$

ただし、

$$\hat{n} = \sum_{\mu} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu}, \quad D \equiv j + \frac{1}{2} (\text{対縮重度}) \quad (\text{P.4})$$

このセットは  $SU(2)$  のリー代数をつくる。<sup>31</sup> 準スピンの大きさ

$$\mathbf{S}^2 = \frac{1}{2} (S_{+} S_{-} + S_{-} S_{+}) + S_0^2 \quad (\text{P.5})$$

の固有値  $S(S+1)$  に対して、 $S$  は seniority (対に組んでいない粒子数)  $\nu$  に対応する：

$$S = \frac{1}{2} (D - \nu) \quad (\text{P.6})$$

#### ◎ 準スピントテンソル<sup>32</sup>

30

- T.Suzuki & K.Matsuyanagi, PTP56(76)1156, LPhys'05 Conf.
- A.Klein & Marshalek, RMP63(1991)375.

<sup>31</sup>前章 G.2.2 の文献。

<sup>32</sup>九州グループ（栗山・丸森・松柳）は、準粒子の運動モードを準スピントテンソルとして分類することにより、準粒子 RPA を奇核に拡張し、低励起集団運動モードを記述することに成功した：

• A.Kuriyama et al., PTP Suppl. 58(1975) および引用文献。

通常の角運動量テンソルと同様に定義する：

$$[S_{\pm}, T_{\lambda\mu}] = [(\lambda \mp \mu)(\lambda \pm \mu + 1)]^{1/2} T_{\lambda\mu\pm 1}, \quad [S_0, T_{\lambda\mu}] = \mu T_{\lambda\mu} \quad (\text{P.7})$$

一粒子生成・消滅演算子 ( $c_{\mu}^{\dagger}, c_{\mu}$ ) および ( $c_{\mu}^{\dagger}, -c_{\mu}$ ) は準スピンに関するスピノルとなる。準スピン・テンソルの行列要素に対しては、Wigner-Eckart 定理が成立する：

$$\langle SM | T_{\lambda\mu} | S' M' \rangle = \frac{1}{2S+1} \langle S' M' \lambda \mu | SM \rangle \langle SM || T_{\lambda} || S' M' \rangle \quad (\text{P.8})$$

したがって、異なるテンソル成分の行列要素の間には

$$\langle SM | T_{\lambda\mu} | S' M' \rangle = \frac{\langle S' M' \lambda \mu | SM \rangle}{\langle S' N' \lambda \nu | S N \rangle} \langle S N | T_{\lambda\nu} | S' N' \rangle \quad (\text{P.9})$$

という関係式が成立する。すなわち、粒子数以外の量子数が等しい行列要素間の関係はCG係数で定まる。

#### ◎ Seniority 量子数

状態を量子数  $S, m$  で指定すると、粒子数  $N$  に対し、

$$m = \frac{1}{2}(N - D) \quad \rightarrow \quad -\frac{D}{2} \leq m \leq \frac{D}{2}, \quad S = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots, \frac{D}{2} \quad (\text{P.10})$$

真空 ( $N = 0$ ) および完全に占有された状態 ( $N = 2D$ ) の状態における  $S, m$  の値は

$$\text{真空 } (N = 0) : |0\rangle = |S = \frac{D}{2}, m = -\frac{D}{2}\rangle, \quad (\text{P.11})$$

$$\text{完全占有 } (N = 2D) : |\text{full}\rangle = |S = \frac{D}{2}, m = \frac{D}{2}\rangle, \quad (\text{P.12})$$

$N$  を与えたとき、許される  $S$  の値は:

$$S = \frac{1}{2}|N - D|, \frac{1}{2}|N - D| + 1, \dots, \frac{D}{2} \quad (\text{P.13})$$

量子数  $S$  の意味は次のようにして理解できる。

- まず、 $\vec{S}^2 |0\rangle = \frac{D}{2}(\frac{D}{2} + 1) |0\rangle$
- 対の数が  $k$  個の状態： $|\psi\rangle \propto (S_+)^k |0\rangle$   
 $[\vec{S}^2, S_+] = 0$  故、この状態の  $S$  は真空と同じ。したがって、適当な規格化定数  $\mathcal{A}$  を用いて

$$|\psi\rangle = |\frac{D}{2}, k - \frac{D}{2}\rangle = \mathcal{A} (S_+)^k |0\rangle \quad (\text{P.14})$$

- 次に、 $k$ -個の対と、状態  $\mu = 1, 2, \dots, v$  が占有された状態は：

$$|\varphi\rangle = \mathcal{A} \prod_{\mu=1}^v c_{\mu}^{\dagger} \cdot (S_+)^k |0\rangle \quad (\text{P.15})$$



これに  $\vec{S}^2$  を作用すると,

$$\vec{S}^2|\varphi\rangle = (S_+S_- + S_0^2 - S_0)|\varphi\rangle = S_+S_-|\varphi\rangle + m(m-1)|\varphi\rangle, \quad m = \frac{1}{2}(2k+v-D) \quad (\text{P.16})$$

ここで

$$S_- \prod_{\mu} c_{\mu}^{\dagger} (S_+)^k = \prod_{\mu} c_{\mu}^{\dagger} \{S_- (S_+)^k - vk(S_+)^{k-1}\} + \sum_{j=1}^v \prod_{i \neq j}^v c_i^{\dagger} (S_+)^k c_j \quad (\text{P.17})$$

より次の結果が得られる。

$$S_+S_-|\varphi\rangle = \left\{ \frac{D}{2} \left( \frac{D}{2} + 1 \right) - \left( k - \frac{D}{2} \right)^2 + k - \frac{D}{2} - vk \right\} |\varphi\rangle \quad (\text{P.18})$$

従って

$$\vec{S}^2|\varphi\rangle = \frac{D-v}{2} \left( \frac{D-v}{2} + 1 \right) |\varphi\rangle, \quad \text{i.e.,} \quad S = \frac{D-v}{2}. \quad (\text{P.19})$$

そこで、不対粒子数 (**seniority**)  $v$  を次式で定義できる：

$$S = \frac{1}{2}(D-v) \quad (\text{P.20})$$

### ◎内部自由度

系の状態は、粒子数  $n$ 、不対粒子数  $v$ 、角運動量  $J, J_0$ 、などの量子数によって分類される。一般には必ずしもこれだけで分類は完了せず、殻模型で状態基底を構成する場合には、これらで指定しきれない状態群の間で（例えば対角化によって）直交基底を構成する。以下では、最初の二つに関係ある量子数  $S, M = S_0$  以外の量子数を  $\Gamma$  とおき、一般の状態を

$$|S, M; \Gamma\rangle \quad (\text{P.21})$$

であらわす（準スピンは角運動量と交換することに注意）。例えば真空は

$$|0\rangle = |S = D/2, M = -D/2; \Gamma_0\rangle \quad (\text{P.22})$$

である（ $\Gamma_0$  には例えば  $J = J_0 = 0$  が含まれる）。

以下で粒子対の自由度を「集団的」自由度と考え、他の「内部」自由度と分離するために、純粋な「内部状態」を、粒子対を含まない状態として定義する。このための条件は

$$S_- | \text{内部} \rangle = 0 \quad \rightarrow \quad | \text{内部} \rangle \in \{ |S, M = -S; \Gamma\rangle \} \quad (\text{P.23})$$

であればよい。

## P.2 状態空間のマッピングと量子ボゴリューボフ変換

対自由度の分離を正確かつ紛らわしくないように実行するため、もとのフェルミオンの状態空間を集団・内部自由度が分離された空間（理想空間とよぶ）へマップする。具体的な処方は

- i) マップされる状態空間を「内部状態」 $|S, \Gamma\rangle$  と「集団状態」 $|N\rangle$  の直積によって構成する。

$$|S, M = -S + N; \Gamma\rangle \equiv |S, \Gamma\rangle |N\rangle \quad (\text{P.24})$$

ここで、 $S, M, \Gamma$  はフェルミオン空間に対応する量子数の範囲を全て含むものとする。

- ii) 対自由度は新しいボソン自由度  $\mathbf{b}^\dagger, \mathbf{b}$  であらわされると設定する：

$$|N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (\mathbf{b}^\dagger)^N |0\rangle, \quad \mathbf{b}|0\rangle = 0 \quad (\text{P.25})$$

- iii) 状態のマッピングを行う変換演算子  $T$  を定義

$$T = \sum_{S=0}^{D/2} \sum_{\Gamma} \sum_{M=-S}^S |S, M; \Gamma\rangle \langle S, M; \Gamma| \quad (\text{P.26})$$

理想空間ではボソン数は無限に大きくなるため、このマッピングは一対一ではなく、中への写像となる。すなわち、

$$T^\dagger T = 1, \quad T T^\dagger = \sum_{S=0}^{D/2} \sum_{\Gamma} \sum_{M=-S}^S |S, M; \Gamma\rangle \langle S, M; \Gamma| \equiv \mathbf{P} \quad (\text{P.27})$$

後の便利のため、この「物理的空間」への射影演算子を

$$\mathbf{P} = \sum_S \sum_{\Gamma} \mathbf{P}_S |S, \Gamma\rangle \langle S, \Gamma|, \quad \mathbf{P}_S = \sum_{N=0}^2 S |N\rangle \langle N| \quad (\text{P.28})$$

のようにあらわしておく。

- vi) もとのフェルミオンの空間の演算子  $Q$  は変換

$$\mathbf{Q} = T \mathbf{Q} T^\dagger \quad (\text{P.29})$$

により、理想空間にマップされる。

- vii) 上記のマッピングを利用して、内部状態を記述する演算子を定義し、この演算子の性質を導く。これによって、もとのフェルミオン系の代わりに、理想空間のみで計算を実行可能にする。

以上のプログラムで問題となる vi), vii) のステップを次に実行する。

#### ◎生成・消滅演算子のマッピング

生成演算子  $c_\mu^\dagger$  をマップした演算子を  $\mathbf{c}^\dagger$  とおくと、

$$\mathbf{c}_\mu^\dagger = T c_\mu^\dagger T^\dagger = \sum_{S, S'} \sum_{\Gamma, \Gamma'} \sum_{M, M'} \langle S M \Gamma | c_\mu^\dagger | S' M' \Gamma' \rangle |S M; \Gamma\rangle \langle S' M'; \Gamma'| \quad (\text{P.30})$$

ここで、 $c^\dagger$  が準スピン・スピノルの  $S_0 = \frac{1}{2}$  成分であることを考慮すると、上記の  $M' = M - 1/2$  に制限され、従って、 $S' = S \pm 1/2$  に限られる。この二つのそれぞれの場合に、

上のフェルミオン空間の行列要素を、(P.9)式を利用して内部状態間の行列要素で置き換えることができる（以下  $\Gamma$  は略）：

$$\langle SM|c_\mu^\dagger|S + \frac{1}{2}, M - \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{S - M + 1}{2S + 1}} \langle S, -S|c_\mu^\dagger|S + \frac{1}{2}, -(S + \frac{1}{2})\rangle \quad (\text{P.31})$$

$$\langle SM|c^\dagger|S - \frac{1}{2}, M - \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{S + M + 1}{2S + 1}} \langle S, -S|c^\dagger|S - \frac{1}{2}, -(S - \frac{1}{2})\rangle \quad (\text{P.32})$$

ここには  $M$  依存性がCG係数から来る因子のみに入っているが、これは、 $M = -S + N$  の関係を用いて、理想空間のボソン数であらわすことができる。これは更に、理想空間のボソン状態にかかる演算子  $\mathbf{b}^\dagger, \mathbf{b}$  であらわせる。一方、同じ因子にあらわれる  $S$  は内部状態に作用する演算子  $\hat{S}$  で置き換える：

$$N|N\rangle = \mathbf{b}^\dagger \mathbf{b}|N\rangle, \quad S|S, -S\rangle = \hat{S}|S, -S\rangle, \quad \text{etc.} \quad (\text{P.33})$$

この結果として得られる式は

$$\mathbf{c}_\mu^\dagger = \mathbf{P} \left\{ \mathbf{a}_\mu^\dagger \sqrt{1 - \frac{\mathbf{b}^\dagger \mathbf{b}}{2\hat{S}}} + \frac{\mathbf{b}^\dagger}{\sqrt{2\hat{S}}} \mathbf{a}_{\bar{\mu}} \right\} \quad (\text{P.34})$$

同様に、スピノルの  $-\frac{1}{2}$  成分である消滅演算子のマッピングは

$$\mathbf{c}_{\bar{\mu}} = \left\{ -\mathbf{a}_\mu^\dagger \frac{\mathbf{b}}{\sqrt{2\hat{S}}} + \sqrt{1 - \frac{\mathbf{b}^\dagger \mathbf{b}}{2\hat{S}}} \right\} \mathbf{P} \quad (\text{P.35})$$

ただし、ここで、内部空間へのマッピングを行う演算子

$$T_i n \equiv \sum_{S=0}^{D/2} \sum_{\Gamma} |S, \Gamma\rangle \langle S, M = -S; \Gamma| \quad (\text{P.36})$$

を用いて、内部空間での演算子

$$\mathbf{a}_\mu^\dagger = T_{in} \mathbf{c}_\mu^\dagger T_{in}^\dagger, \quad \mathbf{a}_{\bar{\mu}} = T_{in} \mathbf{c}_{\bar{\mu}} T_{in}^\dagger \quad (\text{P.37})$$

を定義した。これらの演算子は、以下に見るように、不对粒子の生成・消滅演算子をあらわしており、対をあらわすボソン演算子  $\mathbf{b}^\dagger, \mathbf{b}$  とともに、理想空間の building block を構成している。その特徴を列挙すると：

0) 理想空間では内部自由度と対自由度は完全に独立：

$$[\mathbf{a}_\mu^\dagger, \mathbf{b}^\dagger] = [\mathbf{a}, \mathbf{b}^\dagger] = 0 \quad (\text{P.38})$$

i) (反) 交換関係

$$\{\mathbf{a}_\mu^\dagger, \mathbf{a}_\nu^\dagger\} + = 0, \quad \{\mathbf{a}_\mu, \mathbf{a}_\nu^\dagger\} + = \delta_{\mu\nu} - \mathbf{a}_\mu^\dagger \frac{1}{2\hat{S}} \mathbf{a}_\nu^\dagger \quad (\text{P.39})$$

第二の関係式は、通常のフェルミ粒子と異なり、対自由度が除かれたために交換関係が変化したことを示している。これらの関係式は (P.37) 式に基づいて二つの演算子の積を作り、これを操作して導かれる。例えば ( $\Gamma$  は略)

$$\mathbf{a}_\mu \mathbf{a}_\nu^\dagger = \sum_{S, S', S''} |S\rangle \langle S, -S | c_\mu | S'', -S'' \rangle \langle S'', -S'' | c_\nu^\dagger | S', -S' \rangle \langle S'' | \quad (\text{P.40})$$

ここで  $c^\dagger, c$  は量子数  $S_0$  をそれぞれ  $\pm \frac{1}{2}$  変化させるから、 $-S'' = -S + \frac{1}{2} = -S' + \frac{1}{2}$  が成立する。一方、 $\sum_{S, M} |SM\rangle \langle SM| = 1$  であることを考慮すれば、 $|S'', -S''\rangle \langle S'', -S''| \rightarrow 1 - |S + \frac{1}{2}, -S + \frac{1}{2}\rangle \langle S + \frac{1}{2}, -S + \frac{1}{2}|$  と置き換えることができる。この第二項からあらわれる行列要素は、例えば  $\langle S, -S | c_\mu | S + \frac{1}{2}, -S + \frac{1}{2} \rangle = \langle S, -S | c_\mu S_+ | S + \frac{1}{2}, -S - \frac{1}{2} \rangle / \sqrt{2S} = \langle S, -S | c_\mu^\dagger | S + \frac{1}{2}, -S - \frac{1}{2} \rangle / \sqrt{2S}$  を用いて内部状態の行列要素に置き換えられ、ここから、(P.39) 式の第二項があらわれる。

ii) 準スピンの大きさをあらわす演算子。

$$2\hat{S} = D - \mathbf{n}, \quad \mathbf{n} \equiv \sum_{\mu} \mathbf{a}_\mu^\dagger \mathbf{a}_\mu \quad (\text{P.41})$$

これも右辺を上と同様に計算することにより確かめられる。これは、 $\mathbf{n}$  の固有値が seniority を与えることを示し、 $\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{a}$  が不對粒子の生成・消滅演算子に対応することを支持。また、

$$[\mathbf{n}, \mathbf{a}_\mu^\dagger] = \mathbf{a}_\mu^\dagger, \quad [\mathbf{n}, \mathbf{a}_\mu] = -\mathbf{a}_\mu \quad (\text{P.42})$$

が成立するため、 $\mathbf{n}$  は不對粒子数演算子となる。

iii) 不對条件。同様にして次の関係が証明できる。

$$\sum_{\mu} \mathbf{a}_\mu^\dagger \mathbf{a}_\mu^\dagger = 0 \quad (\text{P.43})$$

もとのフェルミオン空間の演算子は上のマッピングにより、理想空間での自由度  $\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{a}, \mathbf{b}^\dagger, \mathbf{b}$  によってあらわすことができる。このため

$$T(AB)T^\dagger = TAT^\dagger TBT^\dagger \quad (\text{P.44})$$

および演算子間の交換関係を利用する。この際、物理的空間への射影演算子  $\mathbf{P}$  が  $\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{b}^\dagger, \dots$  との交換によって変化することを考慮する。<sup>33</sup> この結果、例えば準スピン演算子は

$$TS_+T^\dagger = \mathbf{P}\mathbf{b}^\dagger \sqrt{2\hat{S} - \mathbf{b}^\dagger \mathbf{b}}, \quad TS_-T^\dagger = \sqrt{2\hat{S} - \mathbf{b}^\dagger \mathbf{b}} \mathbf{P} \quad (\text{P.45})$$

のように Holstein-Primakoff 型の表現が得られる。また、全粒子数演算子は

$$T \sum_{\mu} c_\mu^\dagger c_\mu T^\dagger = \mathbf{P}(\mathbf{n} + 2\mathbf{b}^\dagger \mathbf{b}) \quad (\text{P.46})$$

となり、(対の数の2倍 + 不對粒子数) となる。

### ◎対相関と BCS 近似

<sup>33</sup>実用上は、物理的空間の範囲内で計算するという前提のもとで、 $\mathbf{P}$  を無視して計算しても同じ。

フェルミ粒子のマッピング (P.34) は、「量子ボゴリューボフ変換」と呼ばれる場合がある。実際この変換は、通常は基底状態で固定されている対の数を演算子として量子化したものに対応している。例えば、基底状態では不対粒子がなく、対ボソンが凝縮しているとすれば、

$$\mathbf{b}^\dagger, \mathbf{b} \rightarrow \langle \mathbf{b}^\dagger, \mathbf{b} \rangle = \sqrt{D}v \quad (\text{P.47})$$

とおくことにより、(P.34) の右辺は

$$\mathbf{c}_\mu^\dagger = u\mathbf{a}_\mu^\dagger + v\mathbf{a}, \quad u \equiv \sqrt{1-v^2} \quad (\text{P.48})$$

とボゴリューボフ変換の形になる（違いは準粒子演算子の代わりに対に組めない演算子  $\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{a}$  があらわれる）。

この方法は、対相関とそれ以外の相関の結合を取り扱う際に便利な枠組みを与える。（例えばブロッキング効果など。）また、BCS理論における粒子数非保存の影響も、ここでは粒子数の対自由度部分における揺らぎとしてあらわれる。すなわち、 $\mathbf{b}^\dagger = \langle \mathbf{b}^\dagger \rangle + \tilde{\mathbf{b}}^\dagger$  としたときの第二項が粒子数を回復する効果を担うが、これは内部自由度とは独立である。

### P.3 電子系とハバード模型

強相関電子系：二つの重要な効果

- 1) サイト間の電子ホッピング
- 2) 一つのサイトでの電子間の強い電子反発

モデル化：ハバード模型。各サイトはスピン上下の電子準位が許されるとする。

$$H = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i+} n_{i-} \quad (\text{P.49})$$

但し、

$$c_{i\sigma} : i \text{ 番目のサイトにスピン成分 } \sigma - \pm \frac{1}{2} \text{ の電子の消滅} \quad (\text{P.50})$$

$$n_{i\pm} = c_{i\pm}^\dagger c_{i\pm} \quad (\text{P.51})$$

$$t_{ij} : i \text{ サイトから } j \text{ サイトへの電子のホッピング行列要素} \quad (\text{P.52})$$

$$U : i \text{ 番目のサイトのクーロン行列要素} \quad (\text{P.53})$$

ここで、ホッピングの  $ij$  は、例えば最近接サイト間に働ものとする。

理論的問題は、(P.49) 式の第二項の強い反発力の扱い：強い斥力のため、二電子が一つのサイトに入ることを禁止する効果をどう取り入れるか。

- i) 新しいボソン自由度の導入：スレーブ・ボソンの方法<sup>34</sup>

$$c_{i\sigma}^\dagger = f_{i\sigma}^\dagger b_i \quad (\text{又は } f^\dagger b + f d^\dagger) \quad (\text{P.54})$$

ここで  $f$  は中性のフェルミ粒子 (spinon)、 $b$  は電荷をもつボース粒子 (holon)。ただし、補助条件が必要：

$$b^\dagger b + \sum_\sigma f_\sigma^\dagger f_\sigma = 1 \quad (\text{P.55})$$

- ii) 電子の交換関係の変化<sup>35</sup>

いずれの方法でも、平均場近似によって、系の相図を計算する。

このうち第二の方法は量子ボゴリューボフ変換 (Q B T) を用いたものに一致することを示す。

Q B T の適用： $j = 1/2 \rightarrow D = 2$

このとき、次の関係が成立：

$$\mathbf{c}_\sigma^\dagger \mathbf{c}_{\sigma'}^\dagger = 0 \quad (\text{P.56})$$

$$\mathbf{b}^\dagger \mathbf{c}_\sigma^\dagger = 0 \quad (\text{P.57})$$

したがって、Q B T 変換は次のようになる：

$$c_\sigma^\dagger \rightarrow \mathbf{c}_\sigma^\dagger + \mathbf{b}^\dagger \tilde{c}_\sigma \quad (\text{P.58})$$

$$c_\sigma \rightarrow -\mathbf{c}_\sigma^\dagger \mathbf{b} + \tilde{c}_\sigma \quad (\text{P.59})$$

$$(\text{P.60})$$

<sup>34</sup>P.Coleman, PRB29(1984)3035.8。逆の Slave fermion の方法も可能。D.Yoshioka, JPSJ 58(1989)1516。

<sup>35</sup>S.Nakajima, JPSJ60(1991)742。

またシングレットに組まない「内部」フェルミ粒子の交換関係は

$$\{c_\sigma, c_{\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\sigma\sigma'} - \tilde{c}_{\sigma'}^\dagger \tilde{c}_\sigma \quad (\text{P.61})$$

この変換のもとで元のハバード・ハミルトニアンは

$$H = H_0 - \sum_{ij\sigma} t_{ij} [\tilde{c}_{j\sigma}^\dagger \tilde{c}_{i\sigma} \mathbf{b}_i^\dagger \mathbf{b}_j + (\mathbf{b}_i^\dagger \tilde{c}_{i\sigma} \tilde{c}_{j\sigma} + \text{h.c.})] + U \sum_i \mathbf{b}_i^\dagger \mathbf{b}_i, \quad (\text{P.62})$$

$$H_0 = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \quad (\text{P.63})$$

実際に二電子の占有がない空間での有効ハミルトニアンは、FESHBACH の射影法を用いて

$$H_{\text{eff}} = PHP + PHQ \frac{1}{E - QHQ} QHP \quad (\text{P.64})$$

として得られる。とくに  $U \gg t$  の場合には

$$H_{\text{eff}} = H_0 - \sum_{ij\sigma\sigma'} J_{ij} c_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma'} c_{i\sigma'} + \text{高次項} \quad (\text{P.65})$$

となる（ただし、 $J_{ij}^* = t_{ij}^2/U$ ）。これは中島らの結果に一致。平均場近似では系は超伝導を示す。

この方法はまた、電子対を射影によって除外する Gutzwiller 近似法も再現することが示される。

## P.4 ボソン・フェルミオン系への拡張

無限フェルミ系では、フェルミ面近傍で引力が働くとクーパー対が形成され、この対（複合ボース粒子）が凝縮することにより、BCS転移が実現する。それでは、ボース・フェルミ混合系で、ボース粒子（B）・フェルミ粒子（F）間に引力が働くとどのような現象が予想されるか？

ここで形成される可能性があるのはBF対（複合フェルミ粒子）であり、多数の対が形成される場合、それらはすべて異なった量子数（運動量）をもち、従ってエネルギーも異なる。このため、対が一度に多数形成されることはなく、例えば対相互作用の強度とともに徐々に形成されていくクロスオーバー過程であると予想される。

ボソンとフェルミオンの原子がトラップされた系で、BF対形成による系の相変化を調べる。これを調べる手法として、次の三つのアプローチによる検討を進めている：

- i) BF系の背景のもとでBF二体散乱を計算。BF二体伝播関数の極から、系のスペクトルを導き、系の相の可能性を調べる。
- ii)  $B + F \Leftrightarrow (BF)$  という化学反応の平衡条件から、BF対の結合エネルギーや密度の条件のもとでの系の安定相を調べる。
- iii) BF対相互作用を含む解ける模型によって、相互作用の強さに伴う、系の安定相の変化を調べる。

以下はこの iii) のアプローチによる模型計算。

### P.4.1 模型

ボソン ( $b^\dagger, b$ )・フェルミオン ( $f^\dagger, f$ ) がそれぞれ、縮退度  $D$  の一粒子軌道が  $M$  個ある一粒子状態空間に分布。一粒子状態を  $k = 1, 2, \dots, D$  および  $p = 1, 2, \dots, M$  で特徴づけ、それらはペアリング型の相互作用ハミルトニアンのもとで運動する：

$$H = \sum_{p,k} (\epsilon_p^b b_{pk}^\dagger b_{pk} + \epsilon_p^f f_{pk}^\dagger f_{pk}) - \sum_{p,q} G_{pq} A_p^\dagger A_q \quad (\text{P.66})$$

ただし、

$$A_p^\dagger = \sum_{k=1}^D b_{pk}^\dagger f_{pk}^\dagger. \quad (\text{P.67})$$

$\epsilon^{b(f)}$  は一粒子エネルギー、 $G (> 0)$  は相互作用の強さ。

BF対演算子  $A^\dagger, A$  : 各軌道  $p$  ごとに定義： $(A_p)^2 = 0$ 。

### P.4.2 理想空間への写像

以下ではボソン・フェルミオンの対を複合フェルミ粒子と呼んでおく。<sup>36</sup> フェルミ対の場合に倣って、今回はもとのボース・フェルミ混合系の状態から、複合フェルミ粒子 ( $C^\dagger, C$ ) と対に組む自由度がのぞかれた内部自由度（「準ボソン、準フェルミオン」 $\mathbf{b}^\dagger, \mathbf{b}, \mathbf{f}^\dagger, \mathbf{f}$ ）の

<sup>36</sup> 「Composite fermion」という用語は量子ホール効果などで、磁束と電子の複合系に対して用いられるが、ここでの複合フェルミ粒子はこれとは無関係。



「理想空間」への写像を行なう。いま一つの一粒子軌道  $p$  に注目し、添字  $p$  を省略すると、BF対演算子の従う代数は

$$\{A, A^\dagger\} = Q \equiv D + \hat{N}_b - \hat{N}_f, \quad [Q, A^\dagger] = [Q, A] = 0 \quad (\text{P.68})$$

および

$$\{A, f_k^\dagger\} = b_k, \quad [A, b_k^\dagger] = f_k \quad (\text{P.69})$$

で与えられる。ただし、 $\hat{n}_{b,f}$  はボソン、フェルミオンの粒子数演算子。そこで、系の状態をBF対の数  $n$  および、その他の「内部」量子数  $\Gamma$  ( $N_b - n, N_f - n$  など) で特徴づけることにする： $|n; \Gamma\rangle$  ( $n = 0, 1$ )。<sup>37</sup> 理想空間への写像では、これを複合フェルミ粒子数  $|n\rangle$  ( $n = 0, 1$ ) と内部状態  $|\Gamma\rangle$  の直積状態へ変換する演算子  $T$  により実行する。

$$T = \sum_{n=0,1} \sum_{\Gamma} |n\rangle |\Gamma\rangle \langle n; \Gamma| \quad (\text{P.70})$$

もとのBF空間での演算子  $\hat{O}$  はこれにより  $T\hat{O}T^\dagger$  に移行する。このときあらわれるBF空間の行列要素は、 $\langle 0; \Gamma' | A^m \hat{O} (A^\dagger)^n | 0; \Gamma \rangle$  ( $n, m = 0, 1$ ) という形をしているので、 $A^\dagger, A$  との(反)交換関係および条件  $A|0; \Gamma\rangle = 0$  を用いて内部状態間の行列要素に還元できる。ここで内部状態の基礎的な演算子を

$$\mathbf{f}^\dagger \equiv \sum_{\Gamma, \Gamma'} |\Gamma'\rangle \langle 0; \Gamma' | \mathbf{f}^\dagger | 0; \Gamma \rangle \langle \Gamma| \quad (\text{P.71})$$

および  $b^\dagger, b$  に対応する同様な写像によって  $b_k^\dagger, b_k, f_k^\dagger, f_k$  を定義すると、理想空間を

$$\mathbf{C}^\dagger, \mathbf{C}, \mathbf{b}^\dagger, \mathbf{b}, \mathbf{f}^\dagger, \mathbf{f} \quad (\text{P.72})$$

によって構成できる。これらが従う交換関係は

$$\{\mathbf{C}, \mathbf{C}^\dagger\} = 1, \quad [\mathbf{C}, \mathbf{b}_k^\dagger] = [\mathbf{C}, \mathbf{b}_k] = \{\mathbf{C}, \mathbf{f}_k^\dagger\} = \{\mathbf{C}, \mathbf{f}_k\} = 0, \quad (\text{P.73})$$

$$\{\mathbf{f}_k, \mathbf{f}_q^\dagger\} = \delta_{kq} - \mathbf{b}_k^\dagger \frac{1}{\mathbf{Q}} \mathbf{b}_q, \quad [\mathbf{b}_k, \mathbf{b}_q^\dagger] = \delta_{kq} - \mathbf{f}_k^\dagger \frac{1}{\mathbf{Q}} \mathbf{f}_q \quad (\text{P.74})$$

$$[\mathbf{f}_k, \mathbf{b}_q^\dagger] = -\mathbf{b}_k^\dagger \frac{1}{\mathbf{Q}} \mathbf{f}_q, \quad [\mathbf{f}_k, \mathbf{b}_q] = 0, \quad (\text{P.75})$$

であり、

$$\mathbf{Q} = T\mathbf{Q}T^\dagger = D + \mathbf{n}^b - \mathbf{n}^f \quad (\text{P.76})$$

は軌道の有効縮退度をあらわしている（ここには内部空間の演算子があらわれることに注意）。

<sup>37</sup>このような分類ができることは次のようにしてわかる。系の状態は  $|\psi\rangle \equiv (f^\dagger)^m (b^\dagger)^n |vac\rangle$  という基底で張られる。これに  $\mathbf{Q}$  を作用すると、

$$(D + n - m)|\psi\rangle = \mathbf{Q}|\psi\rangle = A A^\dagger |\psi\rangle + A^\dagger A |\psi\rangle$$

ここで  $D + n - m \neq 0$  ならば、右辺はすでに  $|0; \Gamma\rangle$  と  $|1; \Gamma'\rangle$  の和の形になっているのでOK。  $D + n - m = 0$  となるのは  $n = 0, m = D$  の場合であり、これはすでに内部状態  $|0; \Gamma\rangle$ 。

もとの B F 空間での生成消滅演算子の写像は

$$f_k^\dagger \rightarrow \mathbf{f}_k^\dagger \hat{u} + \hat{v} \mathbf{b}_k, \quad b_k^\dagger \rightarrow \mathbf{b}_k^\dagger \hat{w} + \hat{v} \mathbf{f}_k \quad (\text{P.77})$$

$$\hat{u}, \hat{w} = \sqrt{1 \mp \frac{\mathbf{C}^\dagger \mathbf{C}}{\mathbf{Q}}}, \quad \hat{v} = \mathbf{C}^\dagger \frac{1}{\sqrt{\mathbf{Q}}}, \quad (\text{P.78})$$

ただし、

$$\mathbf{n}^b = \sum_k \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{b}_k, \quad \mathbf{n}^f = \sum_k \mathbf{f}_k^\dagger \mathbf{f}_k. \quad (\text{P.79})$$

また B F 対演算子、粒子数演算子は

$$A^\dagger = \sum_k b_k^\dagger f_k^\dagger \rightarrow \mathbf{C}^\dagger \sqrt{\mathbf{Q}}, \quad (\text{P.80})$$

$$\hat{N}_b = \sum_k b_k^\dagger b_k \rightarrow \mathbf{C}^\dagger \mathbf{C} + \mathbf{n}_b, \quad \hat{N}_f = \sum_k f_k^\dagger f_k \rightarrow \mathbf{C}^\dagger \mathbf{C} + \mathbf{n}_f \quad (\text{P.81})$$

のように写像される。さらに、

$$\sum_k \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{f}_k^\dagger = 0, \quad (\text{P.82})$$

### P.4.3 固有値・固有状態

上の写像によって理想空間でのハミルトニアンが得られる：

$$H = \sum_p \left\{ (\epsilon_p^b + \epsilon_p^f) \mathbf{C}_p^\dagger \mathbf{C}_p + \epsilon_p^b \mathbf{n}_p^b + \epsilon_p^f \mathbf{n}_p^f \right\} - \sum_{p,q} G_{p,q} \mathbf{C}_p^\dagger \mathbf{C}_q \sqrt{\mathbf{Q}_p \mathbf{Q}_q} \quad (\text{P.83})$$

相互作用項は演算子  $\mathbf{Q}_p$  を含むため、各軌道における不対準粒子の数に依存する。このため、不対フェルミ粒子は相互作用をブロックするが、不対ボース粒子が存在すると相互作用は増幅される。

このハミルトニアンは B F 対、不対準粒子のそれぞれの粒子数演算子について対角的であるため、容易に固有値・固有状態を書き下すことができる。いま B F 対の数および各軌道への分布を  $n_C \sum_p n_p^C$ 、 $\Gamma_C$  であらわし、同様に不対準粒子についても  $n^b = \sum_p n_p^b$ 、 $n^f = \sum_p n_p^f$  および分布  $\Gamma_b, \Gamma_f$  であらわすと、固有状態・固有値は：

$$\text{Eigenstate} : |n_C, n^b, n^f; \Gamma\rangle = \prod_{p \in \Gamma_C} \mathbf{C}_p^\dagger \prod_{p, k \in \Gamma_b} \mathbf{b}_{pk}^\dagger \prod_{p, k \in \Gamma_f} \mathbf{f}_{pk}^\dagger |0\rangle \quad (\text{P.84})$$

$$\text{Eigenvalue} : E_{n_C \dots} = \sum_p (\epsilon_p^b + \epsilon_p^f - G Q_p) n_p^C + \sum_p \epsilon_p^b n_p^b + \sum_p \epsilon_p^f n_p^f, \quad (\text{P.85})$$

$$\text{但し } Q_p = D + n_p^b - n_p^f \quad (\text{P.86})$$

### P.4.4 具体的計算例

以下では具体的な計算例として、 $G_{pq} = G \delta_{pq}$  とし、<sup>38</sup> また軌道数および B、F 粒子数を等しく取る： $N_b = N_f = N = M$ 。軌道の数  $M$  を粒子数に等しくとるのは、全ての粒子が複合フェルミ粒子となる可能性を残すため。

<sup>38</sup>フェルミ系のペアリング模型のように  $G_{pq} = G$  とすると、集団的な複合フェルミ粒子が最大一個形成されるだけになる。

固有値・固有状態は上の様に得られるが、状態の数は非常に多いので、ここでは基底状態のふるまいに焦点をおく。とくに、相互作用の強度と、自由なボソン・フェルミオンの系から複合フェルミ粒子系への変化に関心があるので、各  $G$  の値に対し、複合フェルミ粒子の個数が  $n$  個の状態（従って、 $\nu = n_b = n_f = N - n$ ）で基底状態に近いもののエネルギー  $E_n$  を比較して、基底状態を求める。これはもちろん各状態への複合フェルミ粒子、不對ボソン/フェルミオンの詰め方に依存する。例えばまず複合フェルミ粒子をできるだけ下の準位から詰め、その条件で許される範囲で不對ボソン/フェルミオンを下から詰めていくとき、近似的に

$$E_n = \epsilon_1(N - n) + 2 \sum_{p=1}^n \epsilon_p + D \sum_{p=1}^{p_F} \epsilon_p - GD \max(p_F, n_C). \quad (\text{P.87})$$

となる。これは  $G$  が小さくない限り基底状態のよい値となる。この公式によると、全ての粒子が複合フェルミ粒子となる  $G$  の値は、

$$G_{max} = \frac{2}{D}(\epsilon_N - \epsilon_1). \quad (\text{P.88})$$

で与えられる。

等間隔の一粒子エネルギー

$$\epsilon_p^b = \epsilon_p^f \equiv \epsilon_p = p\epsilon \quad (\text{P.89})$$

とし、模型空間を

$$N_b = N_f = 15, \quad D = 6 \quad (\text{P.90})$$

とした場合の計算例を図に示す。

図に見られるように、基底状態は相互作用の強さとともに複合粒子が順次形成されていくクロスオーバー過程をしめしている。この結果は、他のパラメタについても同様。ただし、 $D$  が小さい場合には、相互作用がかなり強くなって初めて複合粒子の形成が順次進むようになる。

公式 (P.87) が成立する領域では、複合粒子数が  $n_C$  の状態と  $n_C + 1$  の状態のエネルギーが一致する  $G$  の値として

$$G = G_{n_C} = \frac{1}{D}(2\epsilon_{n_C} + \epsilon_{p_F} - \epsilon_1) \quad p_F = \frac{1}{D}(N - n_C) \quad (\text{P.91})$$

が導かれる。等間隔エネルギー準位 (P.89) に対して、この値に対するエネルギーは

$$E(G)/\epsilon \sim \frac{D^2}{4}x^2 \quad (x \leq G_{max}/\epsilon) \quad (\text{P.92})$$

となり、計算結果の基底状態のふるまいを再現する。

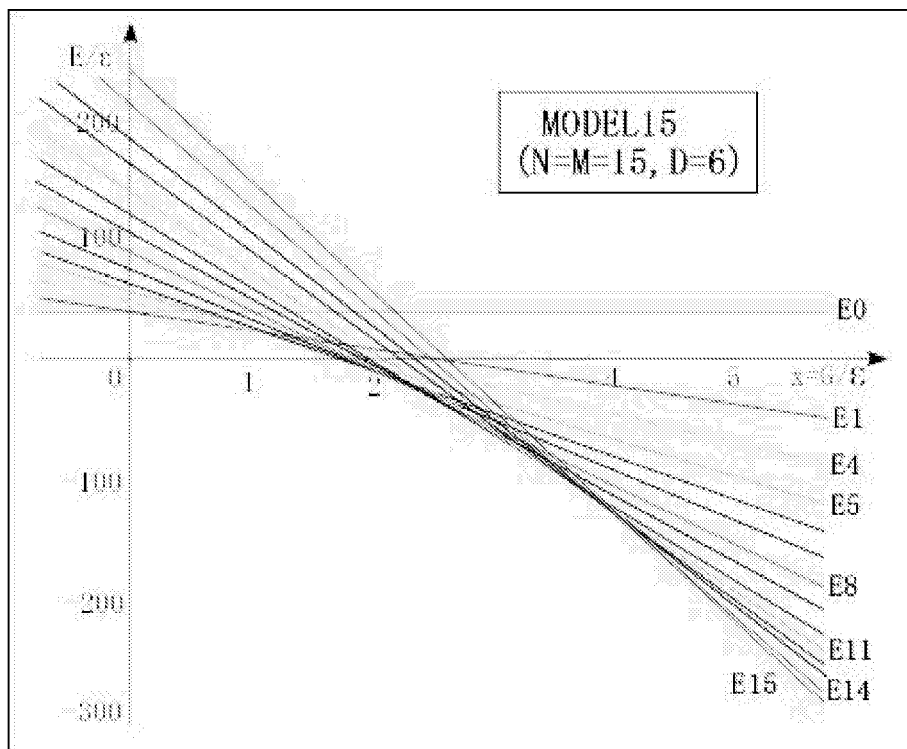


Figure 1: 対相互作用の相対強度  $x = G/\epsilon$  をパラメタとし、複合フェルミ粒子数  $n_C = 0, 1, 4, 5, \dots, 15$  に対する最低エネルギー  $E_{n_C}/\epsilon$  をプロット。模型パラメタは  $M = D = 6$  and  $N_a = N_b = 15$ . 基底状態に寄与し得る状態群のエネルギーのみを示している。

## C. 正準変換の方法による集団自由度の扱い

### C.1 正準変換の方法

#### ◎基本的な考え方

集団変数を抜き出す一つの手法。ゲージ理論における補助条件の設定などを参考に、1950年代にいろいろ試みられた。原子核多体問題における動機は、ボア模型における回転自由度や、慣性率の問題。GCM や射影の方法もその一例と考えることができる。丸森・早川らは正準変換を用いてこれを実行した。<sup>39</sup> この手法を対自由度の分離に適用し、内部自由度と対自由度との結合を議論したものは、A.Kuriyama et al., PTPSuppl.58(1975)にまとめられている。

#### C.1.1 具体的構成

まずボソン生成・消滅演算子による表示で、正準変換による自由度の変換を行なう(以下では全て  $\hbar = 1$  とおく)

- 状態空間の自由度から、(固定した) 集団変数を定義  
ここでは、例えば、ボソン型演算子  $b^\dagger, b$  とする。
- 状態空間の拡張 :  $b^\dagger, b$  を置き換えるべき補助演算子  $\mathbf{b}^\dagger, \mathbf{b}$  を導入

$$[\mathbf{b}, b] = [\mathbf{b}, b^\dagger] = [\mathbf{b}, a] = [\mathbf{b}^\dagger, c^\dagger] = 0 \quad (c^\dagger, c \text{ は、もとの状態空間の任意の演算子}) \quad (\text{C.1})$$

補助条件

$$|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi\rangle|0\rangle, \quad \mathbf{b}|0\rangle = 0 \quad (\text{C.2})$$

- 状態空間の回転演算子

$$U(\theta) = \exp \theta(L_+ - L_-) \quad (\text{C.3})$$

但し、

$$L_+ = \mathbf{b}^\dagger b, \quad L_- = b^\dagger \mathbf{b}, \quad L_0 = \frac{1}{2}(\mathbf{b}^\dagger \mathbf{b} - b^\dagger b - 1) \quad (\text{C.4})$$

は SU(2) を生成 (Schwinger 表現)。 $\mathbf{b}^\dagger, b^\dagger, \mathbf{b}, b$  は準スピンスピノルになる。これらに対し

$$U(\theta) \begin{pmatrix} b^\dagger \\ \mathbf{b} \end{pmatrix} U(\theta)^{-1} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b^\dagger \\ \mathbf{b} \end{pmatrix} \quad (\text{C.5})$$

item 集団変数の抜き出し

$$\mathbf{U}_M \equiv U(\theta = \frac{\pi}{2}) \quad (\text{C.6})$$

---

39

- T.Marumori, PTP 24(1960)331 および引用文献。
- 1950 年代「素粒子論研究」誌上への様々な寄稿。
- S.Tomonaga, PTP13(1955)467,482.
- 背景 : 丸森「原子核の構造 I-VII」(「科学」1958.8-11,1959.1-3)

に対し

$$\mathbf{U}_M b^\dagger \mathbf{U}_M^{-1} = b^\dagger, \quad \mathbf{U}_M b \mathbf{U}_M^{-1} = -b \quad (\text{C.7})$$

が成立するので、これは集団自由度を新しい変数で置き換える。補助条件は

$$|\Psi\rangle \equiv \mathbf{U}_M[|\Psi\rangle|0\rangle], \quad b|\Psi\rangle = 0 \quad (\text{C.8})$$

のように、状態空間は古い集団変数を含まない。

- 任意の演算子  $A$  の変換の具体形 (証明は以下) <sup>40</sup>

$$\mathbf{U}_M A \mathbf{U}_M^{-1} = \sum_{k,\ell=0}^{\infty} (A_{(k\ell)})^{\text{in}} \frac{(b^\dagger)^k}{k!} \frac{(-b)^\ell}{\ell!} \quad (\text{C.9})$$

ここで、

$$A_{(k\ell)} = \underbrace{[b, [b, \dots [b, [b^\dagger, [b^\dagger, \dots [b^\dagger, A]] \dots]]]}_k \underbrace{\dots]}_\ell \quad (\text{C.10})$$

であり、上添字 (in) は任意の演算子に対し

$$Q^{\text{in}} \equiv \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{(-b^\dagger)^m}{m!} \underbrace{[b, [b, \dots [b, [b^\dagger, [b^\dagger, \dots [b^\dagger, Q]] \dots]]]}_m \underbrace{\dots]}_n \frac{b^n}{n!} \quad (\text{C.11})$$

をあらわす。この演算子は集団変数を含まない：

$$[Q^{\text{in}}, b^\dagger] = [Q^{\text{in}}, b] = 0 \quad (\text{C.12})$$

証明：交換関係  $[b, Q^{\text{in}}]$  には、右辺の  $(-b^\dagger)^m$  からの寄与と、その次の多重交換子からの寄与があるが、両者がちょうど打ち消し合う。

式 (C.9) の証明：

変換 (C.3) に対して次の公式が成立する：<sup>41</sup>

$$U(\theta) = e^{\theta(L_+ - L_-)} \quad (\text{C.13})$$

<sup>40</sup>この展開の低次の項は A.Kuriyama et al.,PTP Suppl.58(1975)Ch.1,CH.5 に示されている。

<sup>41</sup>この証明を  $SU(2)$  の基本表現を利用して行なう。

$$e^{\theta(L_+ - L_-)} = e^{f(\theta)L_+} e^{g(\theta)L_-} e^{h(\theta)L_+}$$

のように三つの未知関数  $f, g, h$  を用いて書けたとする。 $SU(2)$  の基本表現

$$L_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_0 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}$$

を用いると、等式の両辺は

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + fg & f + h + fgh \\ g & 1 + gh \end{pmatrix}$$

となる。この各成分が等しいという条件から、

$$f = h = \tan \frac{1}{2}\theta, \quad g = -\sin \theta$$

が得られる。

$$= e^{\tan \frac{\theta}{2} L_+} e^{-\sin \theta L_-} e^{\tan \frac{\theta}{2} L_+} \quad (\text{C.14})$$

$$(\text{C.15})$$

とくに  $\theta = \pi/2$  のとき、

$$\mathbf{U}_M = U\left(\frac{\pi}{2}\right) = U_1 U_2 U_1, \quad U_+ = e^{L_+}, \quad U_- = e^{-L_-} \quad (\text{C.16})$$

まず  $U_1$  で演算子  $A$  を変換すると、

$$U_+ A U_+^{-1} = \sum_n \frac{1}{n!} (\mathbf{b}^\dagger)^n \underbrace{[b, [b, \dots [b, A] \dots]]}_n \quad (\text{C.17})$$

次に  $U_2 \mathbf{b}^\dagger U_2^{-1} = \mathbf{b}^\dagger - b^\dagger$  を用いると

$$U_- U_+ A U_+^{-1} U_-^{-1} = \sum_n \frac{(\mathbf{b}^\dagger - b^\dagger)^n}{n!} \sum_k \underbrace{[b^\dagger, [b^\dagger, \dots [b^\dagger [b, [b, \dots [b, A] \dots]]]}_k \frac{(-\mathbf{b})^k}{k!} \quad (\text{C.18})$$

最後に  $U_+$  により、 $U_+(\mathbf{b}^\dagger - b^\dagger)U_+^{-1} = -b^\dagger$ ,  $U_+ \mathbf{b} U_+^{-1} = \mathbf{b} - b$  を用いて

$$\mathbf{U}_M A \mathbf{U}_M^{-1} = U_+ U_- U_+ A U_+^{-1} U_-^{-1} U_+^{-1} = \sum_{j,k,n=0}^{\infty} \frac{(\mathbf{b}^\dagger)^j (-b^\dagger)^n}{j! n!} \quad (\text{C.19})$$

$$\times \underbrace{[b, [b, \dots [b, [b^\dagger, [b^\dagger, \dots [b^\dagger, [b, [b, \dots [b, A] \dots]]]}_j]}_k \frac{(b - \mathbf{b})^k}{k!} \quad (\text{C.20})$$

ここで、最後の因子を二項展開：

$$= \sum_{j,k,n} \dots \sum_{m=0}^k \frac{b^{k-m} (-\mathbf{b})^m}{(k-m)! m!} \quad (\text{C.21})$$

さらに、和の仕方を

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=m}^{\infty} \quad (\text{C.22})$$

のように置き換え、 $k = m + l$  として  $l$  の和になおす。このとき、 $b^\dagger$  との  $m + l$  重の交換子があらわれるが、 $[b, b^\dagger]$  が他の演算子と可換であるから、任意の位置に移動できる：

$$[b, \dots [b^\dagger, \dots [b, A] \dots]] = [b^\dagger, \dots [b, \dots, [b, A] \dots]] \quad (\text{C.23})$$

従って、公式 (C.9) が得られた。

### C.1.2 正準共役変数による表現

具体的な応用例のために、上の正準変換を座標・運動量型の演算子に置き換える。

$$q = \frac{1}{\sqrt{2}}(b^\dagger + b), \quad p = \frac{i}{\sqrt{2}}(b^\dagger - b) \quad (\text{C.24})$$

$$\mathbf{q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{b}^\dagger + \mathbf{b}), \quad \mathbf{p} = \frac{i}{\sqrt{2}}(\mathbf{b}^\dagger - \mathbf{b}) \quad (\text{C.25})$$

(前のように、パラメタ  $\xi, \eta$  を用いても式は同じ。) 上の変換との関係は

$$U(\theta) = e^{\theta(\mathbf{b}^\dagger b - b^\dagger \mathbf{b})} = e^{i\theta(\mathbf{p}\mathbf{q} - \mathbf{p}q)} \quad (\text{C.26})$$

$$= e^{\tan \frac{\theta}{2} \mathbf{b}^\dagger b} e^{-\sin \theta b^\dagger \mathbf{b}} e^{\tan \frac{\theta}{2} b^\dagger \mathbf{b}} \quad (\text{C.27})$$

$$= e^{i \tan \frac{\theta}{2} \mathbf{p}\mathbf{q}} e^{-i \sin \theta \mathbf{p}q} e^{i \tan \frac{\theta}{2} \mathbf{p}q} \quad (\text{C.28})$$

となる。<sup>42</sup>

とくに  $\theta = \pi/2$  とおくと、丸森による変換

$$\mathbf{U}_M = U_1 U_2 U_1, \quad U_1 = e^{i\mathbf{p}\mathbf{q}}, \quad U_2 = e^{-i\mathbf{p}q} \quad (\text{C.30})$$

が得られる。この変換を用いると、上と同様にして、任意の演算子  $A$  の変換を導ける：

$$\mathbf{U}_M A \mathbf{U}_M^{-1} = \sum_{k, \ell=0}^{\infty} (A_{k\ell})^{\text{in}} \frac{(-i\mathbf{p})^k}{k!} \frac{(i\mathbf{q})^\ell}{\ell!} \quad (\text{C.31})$$

ただし、

$$A_{k\ell} \equiv \underbrace{[q, [q, \dots [q, [p, [p, \dots [p, A] \dots]]]}_k \quad (\text{C.32})$$

であり、(in) は前の定義を  $p, q$  であらわしたもの：

$$Q^{\text{in}} = \sum_{m, n} \frac{(ip)^n}{n!} \underbrace{[q, [q, \dots [q, [p, [p, \dots [p, Q] \dots]]]}_n \frac{(-iq)^m}{m!} \quad (\text{C.33})$$

である。

以上の式の最初の項を幾つか示すと、

$$\mathbf{U}_M A \mathbf{U}_M^{-1} = A_{00}^{\text{in}} - iA_{10}^{\text{in}} \mathbf{p} + iA_{01}^{\text{in}} \mathbf{q} - \frac{1}{2} A_{20}^{\text{in}} \mathbf{p}^2 + A_{11}^{\text{in}} \mathbf{p}\mathbf{q} - \frac{1}{2} A_{02}^{\text{in}} \mathbf{q}^2 + \dots \quad (\text{C.34})$$

であり、

$$A_{00}^{\text{in}} = A + ip[q, A] - i[p, A]q - \frac{1}{2} p^2 [q, [q, A]] + p[q, [p, A]]q - \frac{1}{2} [p, [p, A]]q^2 + \dots \quad (\text{C.35})$$

$$A_{10}^{\text{in}} = [q, A] + ip[q, [q, A]] - i[p, [q, A]]q + \dots, \quad (\text{C.36})$$

$$A_{01}^{\text{in}} = [p, A] + ip[q, [p, A]] - i[p, [p, A]]q + \dots, \quad (\text{C.37})$$

$$A_{20}^{\text{in}} = [q, [q, A]] + \dots, A_{11}^{\text{in}} = [q, [p, A]] + \dots, A_{02}^{\text{in}} = [p, [p, A]] + \dots \quad (\text{C.38})$$

となる。<sup>43</sup>

<sup>42</sup>別の表現として、

$$U(\theta) = e^{i \tan \theta \mathbf{p}\mathbf{q}} e^{\frac{i}{2} (\mathbf{p}q - \mathbf{p}\mathbf{q}) \log(\cos^2 \theta)} e^{-i \tan \theta \mathbf{p}q} \quad (\text{C.29})$$

も導かれる。

<sup>43</sup>この表現の二次までの項は、集団励起の朝永理論で得られたものに対応する。  
H.Kuasawa, K.Yabana, & Toshio Suzuki, PRB56(1997)R10063 参照。



### C.1.3 フェルミ自由度の場合

上で用いた変換はスピンの Schwinger 表現を利用している。しかし、 $SU(2)$  代数はフェルミ粒子でも実現できる：

$$L_+ = \mathbf{c}^\dagger \mathbf{c}, \quad L_- = \mathbf{c}^\dagger \mathbf{c}, \quad , L_0 = \frac{1}{2}(\mathbf{c}^\dagger \mathbf{c} - \mathbf{c}^\dagger \mathbf{c}) \quad (\text{C.39})$$

この代数に基づく正準変換

$$V(\theta) = e^{\theta(L_+ - L_-)} \quad (\text{C.40})$$

を考えると、とくに  $\theta = \pi/2$  で、この変換によって

$$V_M \mathbf{c}^\dagger V_M^{-1} = \mathbf{c}^\dagger, \quad V_M \mathbf{c}^\dagger V_M^{-1} = -\mathbf{c}^\dagger \quad V_M \equiv V\left(\frac{\pi}{2}\right) \quad (\text{C.41})$$

のようにフェルミ演算子の置き換えが実現できる。任意の演算子の展開は前と同様に分解公式

$$V_M = V_1 V_2 V_1, \quad V_1 = e^{L_+}, \quad V_2 = e^{-L_-} \quad (\text{C.42})$$

を用いて実行できる。その結果は、ボソンを用いた場合と異なり、

$$[c, \{c, [\dots \{c^\dagger, [c^\dagger, \{\dots [c, \{c, \dots [c, A]\}\dots]\}\dots]\}] \dots] \quad (\text{C.43})$$

のように交換子・反交換子が交互にあらわれ、この個数に対応した符号が余分にあらわれる。

実際の利用は、系にあらわれるフェルミ型の素励起  $c^\dagger, c$  を補助変数  $\mathbf{c}^\dagger, \mathbf{c}$  で置き換えるために、系の自由度を用いて  $c^\dagger, c$  を構成することが必要になる。前に扱ったボース・フェルミ混合系の複合フェルミ対はその一例。

## C.2 相互作用する粒子系における重心運動の分離

外場中の局所的相互作用する一次元系のハミルトニアンを

$$H = K + U + V = \sum_{k=1}^N \left[ \frac{p_k^2}{2m} + U(x_k) \right] + \sum_{(i,j)} v(x_i - x_j) \quad (\text{C.44})$$

としよう。ここから重心運動を分離するためには、

$$P = \sum p_k, \quad X = \frac{1}{N} \sum x_k \quad (\text{C.45})$$

を補助変数  $\mathbf{P}, \mathbf{X}$  で置き換える：

$$\mathbf{U}_M = e^{i\frac{\pi}{2}(\mathbf{P}\mathbf{X} - \mathbf{P}\mathbf{X})} \quad (\text{C.46})$$

ハミルトニアンは

$$\mathbf{H} = \mathbf{U}_M H \mathbf{U}_M^{-1} = H_{00}^{\text{in}} - iH_{10}^{\text{in}}\mathbf{p} + iH_{01}^{\text{in}}\mathbf{q} - \frac{1}{2}H_{20}^{\text{in}}\mathbf{p}^2 + H_{11}^{\text{in}}\mathbf{p}\mathbf{q} - \frac{1}{2}H_{02}^{\text{in}}\mathbf{q}^2 + \dots \quad (\text{C.47})$$

のように変換され、各係数は  $M = Nm$  として、

$$H_{00}^{\text{in}} = H - \frac{P^2}{M} - \sum_k U'(x_k)X + \frac{P^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_k U''(x_k)X^2 + \dots \quad (\text{C.48})$$

$$= K - \frac{P^2}{2M} + \sum_k U(x_k - X) + V, \quad (\text{C.49})$$

$$H_{10}^{\text{in}} = \frac{iP}{M} - iP \frac{1}{M} = 0, \quad (\text{C.50})$$

$$H_{01}^{\text{in}} = -i \sum U'(x_k) + i \sum U''(x_k)X + \dots = -i \sum_k U'(x_k - X), \quad (\text{C.51})$$

$$H_{20}^{\text{in}} = -\frac{1}{M}, \quad H_{11}^{\text{in}} = 0, \quad , H_{02}^{\text{in}} = -\sum U''(x_k - X), \quad (\text{C.52})$$

等となる。調和振動子に対しては、 $H_{01}^{\text{in}} = 0, H_{02}^{\text{in}} = M\omega^2$  であり、集団変数の二次の項が

$$\mathbf{H}^{(2)} = \frac{1}{2M} \mathbf{P}^2 + \frac{1}{2} M\omega^2 \mathbf{X}^2 \quad (\text{C.53})$$

であり、内部運動と完全に分離する。