

Fermi 粒子系の第二量子化について

— 量子物性学・量子物性学特論 I の授業の補足 —

武藤 哲也

「電光掲示板の譬え」を具体的に表すものとして、場の演算子を考える。

位置 $\mathbf{r}$ に粒子を作る演算子を、 $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$ で、位置 $\mathbf{r}$ の粒子を消す演算子を、 $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ で、それぞれ表す。例えば、これらの場の演算子で金属中の電子を記述する際、場の演算子を、平面波で近似した電子の波動関数

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

で展開して

$$\begin{aligned}\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}\end{aligned}$$

と表した時の、「係数」: $\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}$ と $\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ は、それぞれ、波数 $\mathbf{k}$ とスピン σ を持つ電子の消滅／生成演算子である。

これらの演算子で記述される「電子」が、Fermi 統計を満たすようにするためには、次のような「反交換関係」を設定すればよい。一般の演算子、 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ に対して、反交換子を次で定義する。

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$$

この反交換子を用いて、電子の生成／消滅演算子に次の反交換関係を設定する。

$$\begin{aligned}\{\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger\} &= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \\ \{\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}\} &= \{\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger\} = 0\end{aligned}$$

すると、たとえば、同じ波数、同じスピンを持つ電子を 2 つ生成させようとする、生成演算子 $\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ を 2 回作用させる、則ち、 $(\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger)^2$ が現れることになるが、これは、上の反交換関係から、

$$\{\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger\} = \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger + \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = 2(\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger)^2 = 0$$

となって、恒等的にゼロとなることがわかる。これは、Fermi 粒子系における Pauli の排他律の表現である。また、Pauli の排他律から、ある状態を占める Fermi 粒子の数はゼロか 1 であるが、演算子 $\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \equiv \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}$ を定義すると、この $\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}$ の固有値がゼロか 1 となり、 $\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}$ が電子数演算子を与えることがわかる；

$$\begin{aligned}\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}^2 &= (\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma})^2 = \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} \\ &= \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger (1 - \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}) \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} = \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} \\ &= \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}\end{aligned}$$

一電子のエネルギーを $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ とすれば、自由な電子系の Hamiltonian は、

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}$$

と表される。これは、(実空間の) 場の演算子で表すと、

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}_{\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$$

となることがわかる。一方、(ここでは示さないが) 二体の相互作用は、

$$\hat{H}_I = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\psi}_{\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$$

と表されることがわかっている。この $\hat{H}_I$ を、改めて、Fourier 表示すれば、

$$\hat{H}_I = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}$$

となる。ここで、 $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}.$