version 1.0 / 2015 年 11 月 30 日

格子上の多体シュレディンガー方程式について

田崎晴明

1　一般的な 1 粒子の問題

講義と同様[*1]、格子点 $x \in \{1, \ldots, L\}$ に粒子がある状態を $|\psi_x\rangle$ とする。これらは正規直交性 $\langle\psi_x|\psi_y\rangle = \delta_{x,y}$ を満たす。任意の状態 $|\varphi\rangle$ は係数 $\varphi_x \in \mathbb{C}$ を使って

$$|\varphi\rangle = \sum_{x=1}^{L} \varphi_x |\psi_x\rangle \tag{1.1}$$

と展開できる。

ここで、系を特徴づけるパラメター $\epsilon \in \mathbb{R}$ および $u_x \in \mathbb{R}$（ただし、$x \in \{1, \ldots, L-1\}$）を選んで、対応するハミルトニアンを

$$\mathsf{H}_1 = \sum_{x=1}^{L} \epsilon |\psi_x\rangle\langle\psi_x| - \sum_{x=1}^{L-1} u_x \bigl\{ |\psi_x\rangle\langle\psi_{x+1}| + |\psi_{x+1}\rangle\langle\psi_x| \bigr\} \tag{1.2}$$

とする。粒子が重み u_x で隣り合う格子点 x と $x+1$ のあいだを跳び移るというモデルである。全ての x について $u_x = u > 0$ とすれば講義で扱った最も簡単な問題になる。

エネルギー固有状態のシュレディンガー方程式 $\mathsf{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$ が、

$$\epsilon\varphi_x - u_x\varphi_{x+1} - u_{x-1}\varphi_{x-1} = E\,\varphi_x \quad \text{すべての } x \in \{1, \ldots, L\} \text{ について} \tag{1.3}$$

と書けることは簡単にわかる。ただし、ここで $\varphi_0 = \varphi_{L+1} = 0$ とする（u_0, u_L は定義されていないが問題にならない）。

2　弱接触モデル

L は偶数、$u > 0$ および $0 < \nu \ll 1$ として、

$$u_x = \begin{cases} u & x \neq L/2 \text{ のとき} \\ \nu u & x = L/2 \text{ のとき} \end{cases} \tag{2.1}$$

[*1] これは講義の補足資料なのでこれだけ読んでも意味不明のはずです。

とすれば、講義で説明した二つ目のモデルになる。

この場合のシュレディンガー方程式 (1.3) をあからさまに書けば

$$E\varphi_x = \epsilon\varphi_x - u(\varphi_{x-1} + \varphi_{x+1}) \quad (x \notin \{\frac{L}{2}, \frac{L}{2}+1\}) \tag{2.2}$$
$$E\varphi_{\frac{L}{2}} = \epsilon\varphi_{\frac{L}{2}} - u(\varphi_{\frac{L}{2}-1} + \nu\,\varphi_{\frac{L}{2}+1}) \tag{2.3}$$
$$E\varphi_{\frac{L}{2}+1} = \epsilon\varphi_{\frac{L}{2}+1} - u(\varphi_{\frac{L}{2}+2} + \nu\,\varphi_{\frac{L}{2}}) \tag{2.4}$$

となる。ただし、格子からはみ出るところでは $\varphi_0 = \varphi_{L+1} = 0$ とする。全ての $x \in \{1, \ldots, L\}$ についてこれらが同時に成り立つように E と $|\varphi\rangle$ をセットで求めるのが目標である。

解の候補として

$$\varphi_x = \begin{cases} A\,\sin kx, \quad x = 1, \ldots, \frac{L}{2} \\ B\,\sin(k(L+1-x)), \quad x = \frac{L}{2}+1, \ldots, L \end{cases} \tag{2.5}$$

という形を仮定しよう。$\sin kx$ を $x = (L+1)/2$ で反転したのが $\sin(k(L+1-x))$ であることに注意。$\varphi_0 = \varphi_{L+1} = 0$ は自動的に成り立つ。A, B, k はこれから定める定数である。

(2.5) の形を仮定したことでシュレディンガー方程式の一つ目 (2.2) は満たされる。さらに固有エネルギーと波数 k の関係も

$$E = \epsilon - 2u\cos k \tag{2.6}$$

のように決まる。

シュレディンガー方程式の継ぎ目の部分 (2.3), (2.4) に解の形 (2.5) を代入すると、

$$EA\sin\frac{kL}{2} = \epsilon A\sin\frac{kL}{2} - u\Big\{A\sin\Big(k\Big(\frac{L}{2}-1\Big)\Big) + \nu B\sin\frac{kL}{2}\Big\} \tag{2.7}$$
$$EB\sin\frac{kL}{2} = \epsilon B\sin\frac{kL}{2} - u\Big\{B\sin\Big(k\Big(\frac{L}{2}-1\Big)\Big) + \nu A\sin\frac{kL}{2}\Big\} \tag{2.8}$$

となり、少し整理すれば、それぞれ

$$E = \epsilon - u\Big\{\frac{\sin(k(\frac{L}{2}-1))}{\sin\frac{kL}{2}} + \nu\frac{B}{A}\Big\} \tag{2.9}$$

$$E = \epsilon - u\Big\{\frac{\sin(k(\frac{L}{2}-1))}{\sin\frac{kL}{2}} + \nu\frac{A}{B}\Big\} \tag{2.10}$$

となる。これらが同時に成り立つのは、明らかに $A = B$ および $A = -B$ の二つの場合だけである。(2.6) とあわせれば、

$$2\cos k = \frac{\sin(k(\frac{L}{2}-1))}{\sin\frac{kL}{2}} \pm \nu \tag{2.11}$$

を得る。加法公式を二回使えば、これを

$$\frac{\sin(k(\frac{L}{2}+1))}{\sin\frac{kL}{2}} = \pm\nu \tag{2.12}$$

という形に書き換えられる。与えられた $\nu > 0$ および $+$ と $-$ の符号に対して、条件 (2.12) を満たす k をみつければいい。

$\nu = 0$ のときには単に $\sin(k(\frac{L}{2}+1)) = 0$ となる k を求めればよい。これは、実は当たり前で、格子の長さを $\frac{L}{2}$ とすれば、講義で解いた簡単な場合そのものである。つまり、このとき許される k は、

$$\mathcal{K} = \left\{ \frac{\pi}{\frac{L}{2}+1} n \,\middle|\, n = 1, 2, \ldots, \frac{L}{2} \right\} \tag{2.13}$$

の要素である。

$\nu > 0$ ときは、$n = 1, 2, \ldots, \frac{L}{2}$ の各々に対して $k = \frac{\pi}{\frac{L}{2}+1} n + \Delta k$ とする。条件 (2.12) は、

$$\frac{(-1)^n \sin((\frac{L}{2}+1)\Delta k)}{\sin(\frac{\pi L n}{L+2} + \frac{L}{2}\Delta k)} = \pm\nu \tag{2.14}$$

となる。具体的な評価はしないが、各々の n と $\pm$ について、明らかに解 Δk が存在する。また、$\Delta k = O(\nu)$ である。

以上のことから、$\nu \ll 1$ の際のエネルギー固有状態とエネルギー固有値について、以下の結果が得られる。

エネルギー固有状態・固有値は波数 $k \in \mathcal{K}$（定義は (2.13) を見よ）および符号 $\sigma = \pm 1$ で指定できる。エネルギー固有値は

$$\epsilon^{(k,\sigma)} = \epsilon - 2u\cos k \pm \nu u + O(\nu^2) \tag{2.15}$$

であり、エネルギー固有状態は

$$\varphi_x^{(k,\sigma)} = \begin{cases} \left(\dfrac{L}{2}+1\right)^{-1/2} \sin(kx) + O(\nu), & x = 1, 2, \ldots, \dfrac{L}{2} \\ \sigma\left(\dfrac{L}{2}+1\right)^{-1/2} \sin(k(L+1-x)) + O(\nu), & x = \dfrac{L}{2}+1, \ldots, L \end{cases} \tag{2.16}$$

である。$\mathcal{K}$ の要素の数は $L/2$ なので、固有状態はちょうど L 個あることに注意。

3　多体のエネルギー固有値とエネルギー固有状態について

■準備（1 粒子）　1 節の設定に戻り、ハミルトニアン (1.2) の固有値と固有状態を $\epsilon^{(j)}$ および $|\varphi^{(j)}\rangle$ としよう。つまり、$j = 1, 2, \ldots, L$ について、$\mathsf{H}_1|\varphi^{(j)}\rangle = \epsilon^{(j)}|\varphi^{(j)}\rangle$ が成り立つ。エネルギー固有状態は正規直交性

$$\langle\varphi^{(j)}|\varphi^{(j')}\rangle := \sum_{x=1}^{L}(\varphi_x^{(j)})^*\,\varphi_x^{(j')} = \delta_{j,j'} \tag{3.1}$$

を満たすように選ぶ。

このエネルギー固有状態を

$$|\varphi^{(j)}\rangle = \sum_{x=1}^{L}\varphi_x^{(j)}|\psi_x\rangle \tag{3.2}$$

と展開すると、係数 $\varphi_x^{(j)}$ は、シュレディンガー方程式

$$\epsilon\,\varphi_x^{(j)} - u_x\,\varphi_{x+1}^{(j)} - u_{x-1}\,\varphi_{x-1}^{(j)} = \epsilon^{(j)}\varphi_x^{(j)} \tag{3.3}$$

を満たす（これは (1.3) そのもの)。

■N 粒子系の問題設定　以下では N 粒子の系を考える。粒子の配置を $X = (x_1, x_2, \ldots, x_N)$ とする。これらは（断らない限りは)

$$1 \le x_1 < x_2 < \cdots < x_N \le L \tag{3.4}$$

という大小関係を満たす。配置 X に対応する状態を $|\Psi_X\rangle$ と書く。これらは、$\langle\Psi_X|\Psi_Y\rangle = \delta_{X,Y}$ を満たす。X の取り方は、

$$\Omega = \frac{L!}{N!(L-N)!} \tag{3.5}$$

通りある。状態空間は Ω 次元のベクトル空間である。

N 粒子系の任意の状態 $|\Phi\rangle$ は $|\Phi\rangle = \sum_X \Phi_X|\Psi_X\rangle$ と展開できる。二つの状態の内積は

$$\langle\Phi|\Phi'\rangle := \sum_X(\Phi_X)^*\,\Phi'_X \tag{3.6}$$

である。

ここでの問題に対応する N 粒子のハミルトニアンは、

$$\mathsf{H}_N = \sum_X N\epsilon\,|\Psi_X\rangle\langle\Psi_X| - \sum_{x=1}^{L-1} \sum_{\substack{X,Y \\ (X \overset{x,x+1}{\longleftrightarrow} Y)}} u_x |\Psi_X\rangle\langle\Psi_Y| \tag{3.7}$$

である。ここで、X, Y についての和は、x から $x+1$ あるいは $x+1$ から x に粒子が跳んだときに配置が Y から X に変化するような組み合わせについてとる。

$\mathsf{H}_N|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle$ を満たすエネルギー固有状態 $|\Phi\rangle$ をいつものように $|\Phi\rangle = \sum_X \Phi_X|\Psi_X\rangle$ と展開する。このとき、展開係数 $\Phi_X \in \mathbb{C}$ は、N 体のシュレディンガー方程式

$$N\epsilon\,\Phi_X - \sum_{x=1}^{L-1} \sum_{\substack{Y \\ (X \overset{x,x+1}{\longleftrightarrow} Y)}} u_x \Phi_Y = E\Phi_X \tag{3.8}$$

をすべての X について満たす。Y についての和は、X を固定したとき、上と同じ条件を満たすものについてとる。

ここでも問題は (3.8) を満たす E と $|\Phi\rangle$ をセットで求めることである。これは簡単な問題ではないが、解は以下のように（ややこしいけれど）初等的に求められる[*2]。

■エネルギー固有状態と固有値　$1 \le j_1 < j_2 < \cdots < j_N \le L$ を満たす任意の $j_1, \ldots, j_N$ に対して、

$$\Phi_X^{(j_1,\ldots,j_N)} = \sum_P (-1)^P \varphi_{x_1}^{(j_{P(1)})} \varphi_{x_2}^{(j_{P(2)})} \cdots \varphi_{x_N}^{(j_{P(N)})} \tag{3.9}$$

とする。P は $\{1, 2, \ldots, N\}$ のすべての置換について足し合わせる。$(-1)^P = \pm 1$ は置換のパリティである。ここで、（これは粒子の配置としては「反則」なのだが）X の成分のうちの二つ（たとえば、x_i と x_j）が等しかったとすると、$(-1)^P$ という符号のため、(3.9) はかならずゼロになることに注意しよう。

(3.9) を係数にして、

$$|\Phi^{(j_1,\ldots,j_N)}\rangle = \sum_X \Phi_X^{(j_1,\ldots,j_N)} |\Psi_X\rangle \tag{3.10}$$

という状態を定義する。

このとき、

$$\langle\Phi^{(j_1,\ldots,j_N)}|\Phi^{(j'_1,\ldots,j'_N)}\rangle = \delta_{j_1,j'_1} \cdots \delta_{j_N,j'_N} \tag{3.11}$$

---

*2　ここでの解は「理想フェルミ粒子系」と呼ばれる系の性質を参照して求めている。

および

$$\mathsf{H}_N|\Phi^{(j_1,\ldots,j_N)}\rangle=\Bigl(\sum_{\ell=1}^{N}\epsilon^{(j_\ell)}\Bigr)|\Phi^{(j_1,\ldots,j_N)}\rangle \tag{3.12}$$

が成り立つ。つまり、$|\Phi^{(j_1,\ldots,j_N)}\rangle$ はエネルギー固有状態である。さらに、$j_1,\ldots,j_N$ の取り方はちょうど Ω 通りあるので、(3.11) から $|\Phi^{(j_1,\ldots,j_N)}\rangle$ をすべて集めたものは正規直交基底をなすこともわかる。

以下では上の事実を示す。

■エネルギー固有状態であること　まず、(3.12) から。これは、係数 $\Phi_X^{(j_1,\ldots,j_N)}$ が (3.8) で $E=\sum_{\ell=1}^{N}\epsilon^{(j_\ell)}$ とした等式を満たすこと同じである。そこで、先を見越して (3.9) にエネルギー固有値をかけたものを、次のように変形しよう。

$$\begin{aligned}
&\Bigl(\sum_{\ell=1}^{N}\epsilon^{(j_\ell)}\Bigr)\Phi_X^{(j_1,\ldots,j_N)}\\
&\quad=\sum_{\ell=1}^{N}\sum_{P}(-1)^P\varphi_{x_1}^{(j_{P(1)})}\cdots\varphi_{x_{\ell-1}}^{(j_{P(\ell-1)})}\bigl\{\epsilon^{(j_{P(\ell)})}\varphi_{x_\ell}^{(j_{P(\ell)})}\bigr\}\varphi_{x_{\ell+1}}^{(j_{P(\ell+1)})}\cdots\varphi_{x_N}^{(j_{P(N)})}\\
&\quad=\sum_{\ell=1}^{N}\sum_{P}(-1)^P\varphi_{x_1}^{(j_{P(1)})}\cdots\varphi_{x_{\ell-1}}^{(j_{P(\ell-1)})}\bigl\{\epsilon\varphi_{x_\ell}^{(j_{P(\ell)})}-u_{x_\ell}\varphi_{x_\ell+1}^{(j_{P(\ell)})}-u_{x_\ell-1}\varphi_{x_\ell-1}^{(j_{P(\ell)})}\bigr\}\times\\
&\qquad\qquad\times\varphi_{x_{\ell+1}}^{(j_{P(\ell+1)})}\cdots\varphi_{x_N}^{(j_{P(N)})}
\end{aligned} \tag{3.13}$$

一つ目の等式は、ℓ を 1 から N まで動かすと、$P(\ell)$ も $1,\ldots,N$ をちょうど一回ずつとることから出る。二つ目は (3.3) を使った。

ここで最右辺を定義 (3.9) を使ってコンパクトに書き直せば、

$$\Bigl(\sum_{\ell=1}^{N}\epsilon^{(j_\ell)}\Bigr)\Phi_X^{(j_1,\ldots,j_N)}=N\epsilon\,\Phi_X^{(j_1,\ldots,j_N)}-\sum_{\ell=1}^{N}\bigl\{u_{x_\ell}\Phi_{X(x_\ell\to x_\ell+1)}^{(j_1,\ldots,j_N)}+u_{x_\ell-1}\Phi_{X(x_\ell\to x_\ell-1)}^{(j_1,\ldots,j_N)}\bigr\} \tag{3.14}$$

が得られる。$X(x_\ell\to x_\ell\pm1)$ と書いたのは、

$$X(x_\ell\to x_\ell+1)=(x_1,\ldots,x_{\ell-1},x_\ell+1,x_{\ell+1},\cdots,x_N) \tag{3.15}$$

$$X(x_\ell\to x_\ell-1)=(x_1,\ldots,x_{\ell-1},x_\ell-1,x_{\ell+1},\cdots,x_N) \tag{3.16}$$

のように粒子の配置 $X=(x_1,\ldots,x_N)$ で x_ℓ を左右に一つ動かして作られる粒子の配置である。ここで、$X(x_\ell\to x_\ell\pm1)$ では二つの粒子が同じ位置を占めてしまい、粒子の配置としては許されない可能性があるが、そういうときには定義 (3.9) のために、自動的に $\Phi_{X(x_\ell\to x_\ell\pm1)}^{(j_1,\ldots,j_N)}=0$

となることに注意しよう（ここがうまいところ）。これで、(3.14) に「反則」の項が現れないことがわかる。

(3.14) の右辺には X の可能な「動かし方」がすべて登場していることに注意すれば、これが求める (3.8) そのものとわかる。

■正規直交性　正規直交性 (3.11) を示す。まず定義に従って内積を書くと、

$$\begin{aligned}\langle \Phi^{(j_1,\ldots,j_N)} | \Phi^{(j'_1,\ldots,j'_N)} \rangle &= \sum_X (\Phi_X^{(j_1,\ldots,j_N)})^* \, \Phi_X^{(j'_1,\ldots,j'_N)} \\ &= \sum_X \sum_{P,P'} (-1)^{P+P'} (\varphi_{x_1}^{(j_{P(1)})})^* \, \varphi_{x_1}^{(j'_{P'(1)})} \cdots (\varphi_{x_N}^{(j_{P(N)})})^* \, \varphi_{x_N}^{(j'_{P'(N)})}\end{aligned} \tag{3.17}$$

となる。P と P' はそれぞれ全ての置換について足す。$(-1)^{P+P'} = (-1)^P (-1)^{P'}$ である。

ここで、X についての和の中身 $\sum_{P,P'} (-1)^{P+P'} (\varphi_{x_1}^{(j_{P(1)})})^* \, \varphi_{x_1}^{(j'_{P'(1)})} \cdots (\varphi_{x_N}^{(j_{P(N)})})^* \, \varphi_{x_N}^{(j'_{P'(N)})}$ を（大小関係を仮定しない）一般の $x_1, \ldots, x_N \in \{1, \ldots, L\}$ の関数と考えてみよう。すると、(i) $x_1, \ldots, x_N$ の中に互いに等しい要素があればこの関数は必ずゼロ、(ii) $x_1, \ldots, x_N$ のうちの任意の二つの要素を入れ替えてもこの関数は不変であることがわかる。これらの性質から、X について和をとるかわりに、$x_1, \ldots, x_N \in \{1, \ldots, L\}$ について制限なく和をとったあと全体を $N!$ で割っても同じ結果が得られることがいえる。

これを用いて和を書き直し、(3.1) を使うと、

$$\begin{aligned}&\langle \Phi^{(j_1,\ldots,j_N)} | \Phi^{(j'_1,\ldots,j'_N)} \rangle \\ &\quad = \frac{1}{N!} \sum_{x_1,\ldots,x_N=1}^{L} \sum_{P,P'} (-1)^{P+P'} (\varphi_{x_1}^{(j_{P(1)})})^* \, \varphi_{x_1}^{(j'_{P'(1)})} \cdots (\varphi_{x_N}^{(j_{P(N)})})^* \, \varphi_{x_N}^{(j'_{P'(N)})} \\ &\quad = \frac{1}{N!} \sum_{P,P'} (-1)^{P+P'} \langle \varphi^{(j_{P(1)})} | \varphi^{(j'_{P'(1)})} \rangle \cdots \langle \varphi^{(j_{P(N)})} | \varphi^{(j'_{P'(N)})} \rangle \\ &\quad = \frac{1}{N!} \sum_{P,P'} (-1)^{P+P'} \delta_{j_{P(1)}, j'_{P'(1)}} \cdots \delta_{j_{P(N)}, j'_{P'(N)}}\end{aligned} \tag{3.18}$$

が得られる。今、$(j_1, \ldots, j_N) \neq (j'_1, \ldots, j'_N)$ だったとすると、どんな置換 P, P' をとっても N 個のクロネッカーデルタのいずれかはゼロになる。よって、直交性 $\langle \Phi^{(j_1,\ldots,j_N)} | \Phi^{(j'_1,\ldots,j'_N)} \rangle = 0$ が言えた。

規格化については、上で $(j_1, \ldots, j_N) = (j'_1, \ldots, j'_N)$ とし、

$$\begin{aligned} \langle \Phi^{(j_1,\ldots,j_N)} | \Phi^{(j_1,\ldots,j_N)} \rangle &= \frac{1}{N!} \sum_{P,P'} (-1)^{P+P'} \delta_{j_{P(1)},j_{P'(1)}} \cdots \delta_{j_{P(N)},j_{P'(N)}} \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{P} = 1 \end{aligned} \tag{3.19}$$

となることを見ればいい。クロネッカーデルタの積が 1 なのは $P = P'$ のときのみであり、$(-1)^{P+P} = 1$ であることを使った。