Bogoliubov 変換あれこれ

問題

ハミルトニアンが以下の様に与えられる時、各固有状態のエネルギーを求めたい。

$$H = a^\dagger a + aa$$

このハミルトニアンから直接固有エネルギーを求めることは出来ない。何故ならこのハミルトニアンは対角化されていない、つまり $< 0|H|0 >, < 1|H|1 >, < 2|H|2 >$ の他に $< 2|H|0 >$ も値をもってしまうからである。そこで、演算子 a に適当な変換を施し、このハミルトニアンを $H = \alpha^\dagger \alpha$ の形に変換することを考えよう。但し変換後の演算子 α も $[\alpha, \alpha^\dagger] = 1, [\alpha, \alpha] = [\alpha^\dagger, \alpha^\dagger] = 0$ の交換関係を満たしていなければならない。何故なら α がこの交換関係を満たしていないと $\alpha^\dagger \alpha$ を数演算子とみることが出来なくなってしまうため、$H = \alpha^\dagger \alpha$ の形に帰着できても何の意味も持たなくなってしまうからである。

Postulate(前提条件)

変換前の演算子が a,b、変換後の演算子が α, β が以下の関係を満たしているとする。

$$[a, a^\dagger] = [b, b^\dagger] = 1 \quad , \quad [a, b^\dagger] = [b, a^\dagger] = 0$$
$$[\alpha, \alpha^\dagger] = [\beta, \beta^\dagger] = 1 \quad , \quad [\alpha, \beta^\dagger] = [\beta, \alpha^\dagger] = 0$$

そこで次ページからは、変換後の演算子 α, β が返還前の演算子 a,b の線形結合で作られる時、$H = \alpha^\dagger \alpha + \beta^\dagger \beta$ の形に帰着できるハミルトニアンは、どの様な形のものであるかを逆算して調べてみよう。

Case 1

a,b,α,β に対して以下のような関係が成り立っているとする。この変換によって $\alpha^\dagger\alpha+\beta^\dagger\beta$ の形に帰着できるハミルトニアンを逆算する。

$$\begin{cases}\alpha = ua+vb\\ \beta = sa+tb\end{cases}$$

$$\begin{aligned}
\alpha^\dagger\alpha+\beta^\dagger\beta &= (ua^\dagger+vb^\dagger)(ua+vb)+(sa^\dagger+tb^\dagger)(sa+tb)\\
&= (u^2a^\dagger a+uva^\dagger b+uvb^\dagger a+v^2b^\dagger b)+(s^2a^\dagger a+sta^\dagger b+stb^\dagger a+t^2b^\dagger b)\\
&= (u^2a^\dagger a+2uva^\dagger b+v^2b^\dagger b)+(s^2a^\dagger a+2sta^\dagger b+t^2b^\dagger b)\\
&= (u^2+s^2)a^\dagger a+(v^2+t^2)b^\dagger b+2(uv+st)a^\dagger b
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E_1\alpha^\dagger\alpha+E_2\beta^\dagger\beta &= E_1(ua^\dagger+vb^\dagger)(ua+vb)+E_2(sa^\dagger+tb^\dagger)(sa+tb)\\
&= E_1(u^2a^\dagger a+uva^\dagger b+uvb^\dagger a+v^2b^\dagger b)+E_2(s^2a^\dagger a+sta^\dagger b+stb^\dagger a+t^2b^\dagger b)\\
&= E_1(u^2a^\dagger a+2uva^\dagger b+v^2b^\dagger b)+E_2(s^2a^\dagger a+2sta^\dagger b+t^2b^\dagger b)\\
&= (u^2E_1+s^2E_2)a^\dagger a+(v^2E_1+t^2E_2)b^\dagger b+2(uvE_1+stE_2)a^\dagger b
\end{aligned}$$

この変換は任意の整数組 (u,v,s,t) について成り立つというわけではない。

$$\begin{aligned}
\left[\alpha,\alpha^\dagger\right] &= \alpha\alpha^\dagger-\alpha^\dagger\alpha\\
&= (ua+vb)(ua^\dagger+vb^\dagger)-(ua^\dagger+vb^\dagger)(ua+vb)\\
&= (u^2aa^\dagger+uvbb^\dagger+uvba^\dagger+v^2bb^\dagger)-(u^2a^\dagger a+uva^\dagger b+uvb^\dagger a+v^2b^\dagger b)\\
&= (u^2(a^\dagger a+1)+v^2(b^\dagger b+1))-(u^2a^\dagger a+v^2b^\dagger b)\\
&= u^2+v^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left[\beta,\beta^\dagger\right] &= s^2+t^2\\
\left[\alpha,\beta^\dagger\right] &= 0\\
\left[\beta,\alpha^\dagger\right] &= 0
\end{aligned}$$

前提条件より $\left[\alpha,\alpha^\dagger\right]=\left[\beta,\beta^\dagger\right]=1$ であるから、$u^2+v^2=s^2+t^2=1$ でなくてはならない。これはつまり、$u^2+v^2=1$,$s^2+t^2=1$ が成り立つ任意の整数組 (u,v,s,t) について上の変換が成り立つという事である。例えば $(u,v,s,t)=(\frac{1}{\sqrt{2}},\frac{1}{\sqrt{2}},\frac{1}{\sqrt{2}},\frac{1}{\sqrt{2}})$ の組は交換関係から来る条件を満たすので、その時

$$a^\dagger a+b^\dagger b+2a^\dagger b=\alpha^\dagger\alpha+\beta^\dagger\beta$$

という変換が可能になる。

Case 2

a,b,α, β に対して以下のような関係が成り立っているとする。

$$\begin{cases} \alpha = ua + vb^\dagger \\ \beta = ua^\dagger + vb \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
\alpha^\dagger\alpha + \beta^\dagger\beta &= (ua^\dagger + vb)(ua + vb^\dagger) + (ua + vb^\dagger)(ua^\dagger + vb) \\
&= (u^2a^\dagger a + uva^\dagger b^\dagger + uvba + v^2bb^\dagger) + (u^2aa^\dagger + uvab + uvb^\dagger a^\dagger + v^2b^\dagger b) \\
&= (u^2a^\dagger a + uva^\dagger b^\dagger + uvab + v^2(1 + b^\dagger b)) + (u^2(1 + a^\dagger a) + uvab + uva^\dagger b^\dagger + v^2b^\dagger b) \\
&= 2u^2a^\dagger a + 2v^2b^\dagger b + 2uva^\dagger b^\dagger + 2uvab + (u^2 + v^2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E_1\alpha^\dagger\alpha + E_2\beta^\dagger\beta &= E_1(ua^\dagger + vb)(ua + vb^\dagger) + E_2(ua + vb^\dagger)(ua^\dagger + vb) \\
&= E_1(u^2a^\dagger a + uva^\dagger b^\dagger + uvba + v^2bb^\dagger) + E_2(u^2aa^\dagger + uvab + uvb^\dagger a^\dagger + v^2b^\dagger b) \\
&= E_1(u^2a^\dagger a + uva^\dagger b^\dagger + uvab + v^2(1 + b^\dagger b)) + E_2(u^2(1 + a^\dagger a) + uvab + uva^\dagger b^\dagger + v^2b^\dagger b) \\
&= u^2(E_1 + E_2)a^\dagger a + v^2(E_1 + E_2)b^\dagger b + uv(E_1 + E_2)a^\dagger b^\dagger + uv(E_1 + E_2)ab + (u^2E_1 + v^2E_2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left[\alpha, \alpha^\dagger\right] &= u^2 - v^2 \\
\left[\beta, \beta^\dagger\right] &= v^2 - u^2 \\
\left[\alpha, \beta^\dagger\right] &= 0 \\
\left[\beta, \alpha^\dagger\right] &= 0
\end{aligned}$$

Case 3

a,b,α, β に対して以下のような関係が成り立っているとする。

$$\begin{cases} \alpha = ua + vb^\dagger \\ \beta = va^\dagger + ub \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
\alpha^\dagger\alpha + \beta^\dagger\beta &= (ua^\dagger + vb)(ua + vb^\dagger) + (va + ub^\dagger)(va^\dagger + ub) \\
&= (u^2a^\dagger a + uva^\dagger b^\dagger + uvba + v^2bb^\dagger) + (v^2aa^\dagger + uvab + uvb^\dagger a^\dagger + u^2b^\dagger b) \\
&= (u^2a^\dagger a + uva^\dagger b^\dagger + uvab + v^2(1 + b^\dagger b)) + (v^2(1 + a^\dagger a) + uvab + uva^\dagger b^\dagger + u^2b^\dagger b) \\
&= (u^2 + v^2)a^\dagger a + (u^2 + v^2)b^\dagger b + 2uva^\dagger b^\dagger + 2uvab + (u^2 + v^2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E_1\alpha^\dagger\alpha + E_2\beta^\dagger\beta &= E_1(ua^\dagger + vb)(ua + vb^\dagger) + E_2(va + ub^\dagger)(va^\dagger + ub) \\
&= E_1(u^2a^\dagger a + uva^\dagger b^\dagger + uvba + v^2bb^\dagger) + E_2(v^2aa^\dagger + uvab + uvb^\dagger a^\dagger + u^2b^\dagger b) \\
&= E_1(u^2a^\dagger a + uva^\dagger b^\dagger + uvab + v^2(1 + b^\dagger b)) + E_2(v^2(1 + a^\dagger a) + uvab + uva^\dagger b^\dagger + u^2b^\dagger b) \\
&= (u^2E_1 + v^2E_2)a^\dagger a + (u^2E_2 + v^2E_1)b^\dagger b + uv(E_1 + E_2)a^\dagger b^\dagger + uv(E_1 + E_2)ab + (u^2E_1 + v^2E_2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left[\alpha, \alpha^\dagger\right] &= u^2 - v^2 \\
\left[\beta, \beta^\dagger\right] &= u^2 - v^2 \\
\left[\alpha, \beta^\dagger\right] &= 0 \\
\left[\beta, \alpha^\dagger\right] &= 0
\end{aligned}$$

ポイントは Case2 は $u^2 - v^2 = v^2 - u^2 = 1$ が要求されるのに対し、Case3 は $u^2 - v^2 = 1$ しか要求されないので、Case3 の方が u,v の任意性が高い事にある。

Case 4

a,b,α,β に対して以下のような関係が成り立っているとする。

$$\begin{cases} \alpha = ua + v^* b^\dagger \\ \beta = va^\dagger + u^* b \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
\alpha^\dagger\alpha + \beta^\dagger\beta &= (u^*a^\dagger + vb)(ua + v^*b^\dagger) + (v^*a + ub^\dagger)(va^\dagger + u^*b) \\
&= (|u|^2 a^\dagger a + u^*v^*a^\dagger b^\dagger + uvba + |v|^2 bb^\dagger) + (|v|^2 aa^\dagger + u^*v^*ab + uvb^\dagger a^\dagger + |u|^2 b^\dagger b) \\
&= (|u|^2 a^\dagger a + u^*v^*a^\dagger b^\dagger + uvab + |v|^2(1 + b^\dagger b)) + (|v|^2(1 + a^\dagger a) + u^*v^*ab + uva^\dagger b^\dagger + |u|^2 b^\dagger b) \\
&= (|u|^2 + |v|^2)a^\dagger a + (|u|^2 + |v|^2)b^\dagger b + (u^*v^* + uv)a^\dagger b^\dagger + (u^*v^* + uv)ab + (|u|^2 + |v|^2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E_1\alpha^\dagger\alpha + E_2\beta^\dagger\beta &= E_1(u^*a^\dagger + vb)(ua + v^*b^\dagger) + E_2(v^*a + ub^\dagger)(va^\dagger + u^*b) \\
&= E_1(|u|^2 a^\dagger a + u^*v^*a^\dagger b^\dagger + uvba + |v|^2 bb^\dagger) + E_2(|v|^2 aa^\dagger + u^*v^*ab + uvb^\dagger a^\dagger + |u|^2 b^\dagger b) \\
&= E_1(|u|^2 a^\dagger a + u^*v^*a^\dagger b^\dagger + uvab + |v|^2(1 + b^\dagger b)) + E_2(|v|^2(1 + a^\dagger a) + u^*v^*ab + uva^\dagger b^\dagger + |u|^2 b^\dagger b) \\
&= (E_1|u|^2 + E_2|v|^2)a^\dagger a + (E_2|u|^2 + E_1|v|^2)b^\dagger b \\
&\qquad + (E_1u^*v^* + E_2uv)a^\dagger b^\dagger + (E_2u^*v^* + E_1uv)ab + (E_1|u|^2 + E_2|v|^2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left[\alpha, \alpha^\dagger\right] &= |u|^2 - |v|^2 \\
\left[\beta, \beta^\dagger\right] &= |u|^2 - |v|^2 \\
\left[\alpha, \beta^\dagger\right] &= 0 \\
\left[\beta, \alpha^\dagger\right] &= 0
\end{aligned}$$

Bogoliubov 変換

今までは、変換後のハミルトニアンから元のハミルトニアンを逆算していた。しかし前提条件は a, b も α, β も同様の交換関係を満たすという事だけだったので、a, b と α, β を反転させても良い。つまり Case1 を例にとると

$$\begin{cases} \alpha = ua + vb \\ \beta = sa + tb \end{cases} \quad \text{の条件下では、} \quad \alpha^\dagger\alpha + \beta^\dagger\beta = (u^2 + s^2)a^\dagger a + (v^2 + t^2)b^\dagger b + 2(uv + st)a^\dagger b$$

という変換は、以下のように見ることができる。

$$\begin{cases} a = u\alpha + v\beta \\ b = s\alpha + t\beta \end{cases} \quad \text{の条件下では、} \quad a^\dagger a + b^\dagger b = (u^2 + s^2)\alpha^\dagger\alpha + (v^2 + t^2)\beta^\dagger\beta + 2(uv + st)\alpha^\dagger\beta$$

この事から、あるハミルトニアンが与えられた時

$$H = a^\dagger a + b^\dagger b + a^\dagger b^\dagger + a^\dagger b + ab$$

ここに

$$\begin{cases} a = u\alpha + v\beta \\ b = s\alpha + t\beta \end{cases}$$

と言う様に代入し、

$$H = (\qquad)\alpha^\dagger\alpha + (\qquad)\beta^\dagger\beta + (\qquad)\alpha^\dagger\beta^\dagger + (\qquad)\alpha^\dagger\beta + ...$$

で、$\alpha^\dagger\alpha, \beta^\dagger\beta$ 以外の係数がゼロとなるように係数 u,v,s,t を取ればよい。但し、$[\alpha, \alpha^\dagger]$ と $[\beta, \beta^\dagger]$ からくる u,v,s,t の条件にも注意する。この変換を Bogoliubov 変換と呼ぶ。

Case1〜4 を見れば分かるように、変換式の対称性を下げれば下げるほど変換後の係数は複雑になる。確かに係数の構造が複雑であるほうが係数=0 を満たす変換係数の組は増えるはずだが、それを探すことは困難である。そのため、変換係数はできれば実数の範囲で、もっと欲を言えば 4 つの変換係数でなく 2 つくらいの変換係数になるような条件から試していくことになる。

Example

$$H = \frac{gN^2}{2V} + \sum \frac{P^2}{2m} a_P^\dagger a_P + \frac{1}{2} gn \sum_{P\neq 0} \left(2a_P^\dagger a_P + a_P^\dagger a_{-P}^\dagger + a_P a_{-P} + \frac{mgn}{P^2} \right)$$

$$\begin{cases} a_P = u_P b_P + v_{-P}^* b_{-P}^\dagger \\ a_{-P} = \alpha b_P^\dagger + \beta b_{-P} \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
H_1 &= \frac{gN^2}{2V} + \sum \frac{P^2}{2m} a_P^\dagger a_P + \frac{1}{2} gn \sum_{P\neq 0} \left(2a_P^\dagger a_P + \frac{mgn}{P^2} \right) \\
&= \frac{gN^2}{2V} + \sum_{P\neq 0} \left(\frac{P^2}{2m} + gn \right) a_P^\dagger a_P + \frac{1}{2} gn \sum_{P\neq 0} \left(\frac{mgn}{P^2} \right) \\
&= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2} gn \sum_{P\neq 0} \left(\frac{mgn}{P^2} \right) + \sum_{P\neq 0} \left(\frac{P^2}{2m} + gn \right) \left(u_P^* b_P^\dagger + v_{-P} b_{-P} \right) \left(u_P b_P + v_{-P}^* b_{-P}^\dagger \right) \\
&= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2} gn \sum_{P\neq 0} \left(\frac{mgn}{P^2} \right) + \sum_{P\neq 0} \left(\frac{P^2}{2m} + gn \right) \left(|u_P|^2 b_P^\dagger b_P + u_P^* v_{-P}^* b_P^\dagger b_{-P}^\dagger + u_P v_{-P} b_{-P} b_P + |v_{-P}|^2 b_{-P} b_{-P}^\dagger \right) \\
&= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2} gn \sum_{P\neq 0} \left(\frac{mgn}{P^2} \right) \\
&\quad + \sum_{P\neq 0} \left(\frac{P^2}{2m} + gn \right) \left(|u_P|^2 b_P^\dagger b_P + |v_{-P}|^2 b_{-P}^\dagger b_{-P} + u_P^* v_{-P}^* b_P^\dagger b_{-P}^\dagger + u_P v_{-P} b_P b_{-P} + |v_{-P}|^2 \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_2 &= \frac{1}{2} gn \sum_{P\neq 0} \left(a_P^\dagger a_{-P}^\dagger + a_P a_{-P} \right) \\
&= \frac{1}{2} gn \sum_{P\neq 0} \left[\left(u_P^* b_{-P}^\dagger + v_{-P} b_{-P} \right) \left(\alpha^* b_P + \beta^* b_{-P}^\dagger \right) + \left(u_P b_P + v_{-P}^* b_{-P}^\dagger \right) \left(\alpha b_P^\dagger + \beta b_{-P} \right) \right] \\
&= \frac{1}{2} gn \sum_{P\neq 0} [u_P^* \alpha^* b_P^\dagger b_P + u_P^* \beta^* b_P^\dagger b_{-P}^\dagger + v_{-P} \alpha^* b_{-P} b_P + v_{-P} \beta^* b_{-P} b_{-P}^\dagger \\
&\qquad + u_P \alpha b_P b_P^\dagger + u_P \beta b_P b_{-P} + v_{-P}^* \alpha b_{-P}^\dagger b_P^\dagger + v_{-P}^* \beta b_{-P}^\dagger b_{-P}] \\
&= \frac{1}{2} gn \sum_{P\neq 0} [\left(u_P^* \alpha^* + u_P \alpha \right) b_P^\dagger b_P + \left(v_{-P}^* \beta + v_{-P} \beta^* \right) b_{-P}^\dagger b_{-P} + \left(u_P^* \beta^* + v_{-P}^* \alpha \right) b_P^\dagger b_{-P}^\dagger \\
&\qquad + \left(u_P \beta + v{-}P \alpha^* \right) b_P b_{-P} + \left(u_P \alpha + v_{-P} \beta^* \right)]
\end{aligned}$$

H_2 について様々な α, β を代入し、その時の各項の係数を表にしてみる。

(α,β) \ H_2	$b_P^\dagger b_P$	$b_{-P}^\dagger b_{-P}$	$b_P b_{-P}$	$b_P^\dagger b_{-P}^\dagger$	無し
a(u_P,v_{-P}^*)	$u_P^{*2}+u_P^2$	$v_{-P}^{*2}+v_{-P}^2$	$u_P v_{-P}^* + u_P^* v_{-P}$	$u_P v_{-P}^* + u_P^* v_{-P}$	$u_P^2+v_{-P}^2$
b(u_P^*,v_{-P})	$2\|u_P\|^2$	$2\|v_{-P}\|^{*2}$	$2u_P^* v_{-P}^*$	$2u_P v_{-P}$	$\|u_P\|^2+\|v_{-P}\|^2$
c(u_{-P},v_P^*)	$u_P^* u_{-P}^* + u_P u_{-P}$	$v_P^* v_{-P}^* + v_P v_{-P}$	$u_P v_P + u_{-P} v_{-P}$	$u_P v_P^* + u_{-P}^* v_{-P}$	$u_P u_{-P} + v_P v_{-P}$
d(u_{-P}^*,v_P)	$u_P^* u_{-P} + u_P u_{-P}^*$	$v_P v_{-P}^* + v_P^* v_{-P}$	$u_P^* v_P^* + u_{-P}^* v_{-P}^*$	$u_P v_P + u_{-P} v_{-P}$	$u_P u_{-P}^* + v_P^* v_{-P}$
e(v_P,u_{-P}^*)	$u_P^* v_P^* + u_P v_P$	$u_{-P}^* v_{-P}^* + u_{-P} v_{-P}$	$u_P^* u_{-P} + v_P v_{-P}^*$	$u_P u_{-P}^* + v_P^* v_{-P}$	$u_P v_P + u_{-P} v_{-P}$
f(v_P^*,u_{-P})	$u_P^* v_P + u_P v_P^*$	$u_{-P} v_{-P}^* + u_{-P}^* v_{-P}$	$u_P^* u_{-P}^* + v_P^* v_{-P}^*$	$u_P u_{-P} + v_P v_{-P}$	$u_P v_P^* + u_{-P}^* v_{-P}$
g(v_{-P},u_P^*)	$u_P^* v_{-P}^* + u_P v_{-P}$	$u_P^* v_{-P}^* + u_P v_{-P}$	$\|u_p\|^2+\|v_{-P}\|^2$	$\|u_p\|^2+\|v_{-P}\|^2$	$2u_P v_{-P}$
h(v_{-P}^*,u_P)	$u_P^* v_{-P} + u_P v_{-P}^*$	$u_P v_{-P}^* + u_P^* v_{-P}$	$u_p^{*2}+v_{-P}^{*2}$	$u_p^2+v_{-P}^2$	$u_P v_{-P}^* + u_P^* v_{-P}$

すると、消したい項 $b_{-P}^\dagger b_{-P}$、$b_P^\dagger b_{-P}^\dagger$ の係数が同じ値になっているパターン a またはパターン g を選ぶのが、良い選択ということになる。さらに係数 u,v が実数であるとすると、以下のようになる。

$$
\begin{aligned}
H_1 &= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2} gn \sum_{P\neq 0} \left(\frac{mgn}{P^2}\right) \\
&\quad + \sum_{P\neq 0} \left(\frac{P^2}{2m} + gn\right) \left(|u_P|^2 b_P^\dagger b_P + |v_{-P}|^2 b_{-P}^\dagger b_{-P} + u_P v_{-P} \left(b_P^\dagger b_{-P}^\dagger + b_P b_{-P} \right) + |v_{-P}|^2 \right)
\end{aligned}
$$

$$
H_2 = \frac{1}{2} gn \sum_{P\neq 0} \left[(2u_P\alpha)\, b_P^\dagger b_P + (2v_{-P}\beta)\, b_{-P}^\dagger b_{-P} + (u_P\beta + v_{-P}\alpha) \left(b_P^\dagger b_{-P}^\dagger + b_P b_{-P} \right) + (u_P\alpha + v_{-P}\beta) \right]
$$

(α,β) \ H_2	$b_P^\dagger b_P$	$b_{-P}^\dagger b_{-P}$	$b_P b_{-P} + b_P^\dagger b_{-P}^\dagger$	無し
a(u_P,v_{-P}^*)	$2u_P^2$	$2v_{-P}^2$	$2u_P v_{-P}$	$u_P^2+v_{-P}^2$
b(u_P^*,v_{-P})	$2\|u_P\|^2$	$2\|v_{-P}\|^2$	$2u_P v_{-P}$	$\|u_P\|^2+\|v_{-P}\|^2$
c(u_{-P},v_P^*)	$2u_P u_{-P}$	$2v_P v_{-P}$	$u_P v_P + u_{-P} v_{-P}$	$u_P u_{-P} + v_P v_{-P}$
d(u_{-P}^*,v_P)	$2u_P u_{-P}$	$2v_P v_{-P}$	$u_P v_P + u_{-P} v_{-P}$	$u_P u_{-P} + v_P v_{-P}$
e(v_P,u_{-P}^*)	$2u_P v_P$	$2u_{-P} v_{-P}$	$u_P u_{-P} + v_P v_{-P}$	$u_P v_P + u_{-P} v_{-P}$
f(v_P^*,u_{-P})	$2u_P v_P$	$2u_{-P} v_{-P}$	$u_P u_{-P} + v_P v_{-P}$	$u_P v_P + u_{-P} v_{-P}$
g(v_{-P},u_P^*)	$2u_P v_{-P}$	$2u_P v_{-P}$	$\|u_p\|^2+\|v_{-P}\|^2$	$2u_P v_{-P}$
h(v_{-P}^*,u_P)	$2u_P v_{-P}$	$2u_P v_{-P}$	$u_p^2+v_{-P}^2$	$2u_P v_{-P}$

ここではパターン g を選択してみよう。

$$
\begin{aligned}
H &= H_1 + H_2 \\
&= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2} gn \sum_{P\neq 0} \left(\frac{mgn}{P^2} \right) \\
&\quad + \sum_{P\neq 0} \left(\frac{P^2}{2m} + gn \right) \left(|u_P|^2 b_P^\dagger b_P + |v_{-P}|^2 b_{-P}^\dagger b_{-P} + u_P v_{-P} \left(b_P^\dagger b_{-P}^\dagger + b_P b_{-P} \right) + |v_{-P}|^2 \right) \\
&\quad + \frac{1}{2} gn \sum_{P\neq 0} \left[2u_P v_{-P} \left(b_P^\dagger b_P + b_{-P}^\dagger b_{-P} \right) + \left(|u_P|^2 + |v_{-P}|^2 \right) \left(b_P^\dagger b_{-P}^\dagger + b_P b_{-P} \right) + (2u_P v_{-P}) \right] \\
&= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2} gn \sum_{P\neq 0} \left(\frac{mgn}{P^2} \right) \\
&\quad + \sum_{P\neq 0} \left[\left(\frac{P^2}{2m} + gn \right) |u_P|^2 + (gn) u_P v_{-P} \right] b_P^\dagger b_P \\
&\quad + \sum_{P\neq 0} \left[\left(\frac{P^2}{2m} + gn \right) |v_{-P}|^2 + (gn) u_P v_{-P} \right] b_{-P}^\dagger b_{-P} \\
&\quad + \sum_{P\neq 0} \left[\left(\frac{P^2}{2m} + gn \right) u_P v_{-P} + \frac{1}{2} gn \left(|u_P|^2 + |v_{-P}|^2 \right) \right] \left(b_P^\dagger b_{-P}^\dagger + b_P b_{-P} \right) \\
&\quad + \sum_{P\neq 0} \left[\left(\frac{P^2}{2m} + gn \right) |v_{-P}|^2 + (gn) u_P v_{-P} \right]
\end{aligned}
$$

交換関係から導かれる u_P, v_{-P} の関係式は

$$
\begin{aligned}
\left[a_P, a_P^\dagger \right] &= u_P^2 - v_{-P}^2 \\
\left[a_{-P}, a_{-P}^\dagger \right] &= u_P^2 - v_{-P}^2 \\
\left[a_P, a_{-P}^\dagger \right] &= 0 \\
\left[a_{-P}, a_P^\dagger \right] &= 0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left[b_P, b_P^\dagger \right] &= \frac{1}{u_P^2 - v_{-P}^2} \\
\left[b_{-P}, b_{-P}^\dagger \right] &= \frac{1}{u_P^2 - v_{-P}^2} \\
\left[b_P, b_{-P}^\dagger \right] &= 0 \\
\left[b_{-P}, b_P^\dagger \right] &= 0
\end{aligned}
$$

以上より我々が探すべきものは、

$$u_P^2 - v_{-P}^2 = 1 \tag{1}$$

を満たす u_P, v_{-P} の中で、$b_P^\dagger b^\dagger_{-P}$ および $b_P b_{-P}$ の係数が零になるもの、つまり

$$\left(\frac{P^2}{2m} + gn\right) u_P v_{-P} + \frac{1}{2} gn \left(|u_P|^2 + |v_{-P}|^2\right) = 0 \tag{2}$$

となるものである。(1) を満たす関数の組は

$$u_P = \pm\sqrt{x+1} \qquad , \qquad v_{-P} = \pm\sqrt{x} \tag{3}$$

$$u_P = \pm\sqrt{\frac{x+1}{2}} \qquad , \qquad v_{-P} = \pm\sqrt{\frac{x+1}{2}} \tag{4}$$

$$u_P = \pm\cosh x \qquad , \qquad v_{-P} = \pm\sinh x \tag{5}$$

など様々なものがあるが、ここでは (4) を使って計算してみよう。u_P, v_{-P} ともその符号が正であっても負であっても (4) を満たすことができる。しかしながら u_P, v_{-P} が同符号だと、それを (2) に入れた時に２項とも同符号となり、$u_P = v_{-P} = 0$ という解しか現れなくなってしまう。そこで u_P, v_{-P} のうち片方を負に取る必要がある。ここでは v_{-P} を負にとろう。

$$u_P = \sqrt{\frac{x+1}{2}} \qquad , \qquad v_{-P} = -\sqrt{\frac{x+1}{2}} \tag{6}$$

これを (2) に代入すると

$$\begin{aligned}
\left(\frac{P^2}{2m} + gn\right) u_P v_{-P} + \frac{1}{2} gn \left(|u_P|^2 + |v_{-P}|^2\right) &= 0 \\
-\left(\frac{P^2}{2m} + gn\right) \frac{\sqrt{(x+1)(x-1)}}{2} + \frac{1}{2} gn \left(\frac{x+1}{2} + \frac{x-1}{2}\right) &= 0 \\
-\left(\frac{P^2}{2m} + gn\right) \sqrt{x^2-1} + (gn)x &= 0 \\
\left(\frac{P^2}{2m} + gn\right)^2 (x^2-1) &= (gn)^2 x^2 \\
\left(\left(\frac{P^2}{2m} + gn\right)^2 - (gn)^2\right) x^2 &= \left(\frac{P^2}{2m} + gn\right)^2 \\
\left(A^2 - (gn)^2\right) x^2 &= A^2 \\
x &= \sqrt{\frac{A^2}{A^2 - (gn)^2}}
\end{aligned}$$

いま、u_P, v_{-P} は実数であると仮定していたので、x の符号は正を取った。以上より条件 (1)(2) を満たす u_P, v_{-P} は

$$\begin{cases} u_P = \pm\sqrt{\frac{x+1}{2}} \\ v_{-P} = \pm\sqrt{\frac{x+1}{2}} \end{cases} \quad , \quad x = \sqrt{\frac{A^2}{A^2-(gn)^2}} \quad , \quad A = \frac{P^2}{2m} + gn$$

ではこれをハミルトニアンに代入してゆこう。

$$\begin{aligned}
H &= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2}gn\sum_{P\neq 0}\left(\frac{mgn}{P^2}\right) \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[\left(\frac{P^2}{2m}+gn\right)|u_P|^2 + (gn)u_Pv_{-P}\right]b_P^\dagger b_P \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[\left(\frac{P^2}{2m}+gn\right)|v_{-P}|^2 + (gn)u_Pv_{-P}\right]b_{-P}^\dagger b_{-P} \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[\left(\frac{P^2}{2m}+gn\right)u_Pv_{-P} + \frac{1}{2}gn\left(|u_P|^2+|v_{-P}|^2\right)\right]\left(b_P^\dagger b_{-P}^\dagger + b_Pb_{-P}\right) \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[\left(\frac{P^2}{2m}+gn\right)|v_{-P}|^2 + (gn)u_Pv_{-P}\right] \\
&= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2}gn\sum_{P\neq 0}\left(\frac{mgn}{P^2}\right) \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[A|u_P|^2 + (gn)u_Pv_{-P}\right]b_P^\dagger b_P \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[A|v_{-P}|^2 + (gn)u_Pv_{-P}\right]b_{-P}^\dagger b_{-P} \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[A|v_{-P}|^2 + (gn)u_Pv_{-P}\right] \\
&= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2}gn\sum_{P\neq 0}\left(\frac{mgn}{P^2}\right) \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[A(|u_P|^2+|v_{-P}|^2) + (2gn)u_Pv_{-P}\right]b_P^\dagger b_P \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[A|v_{-P}|^2 + (gn)u_Pv_{-P}\right]
\end{aligned}$$

最後の変形は u_P, v_{-P} が x にしかよらず、x は P^2 にしかよらないため、$P \to -P$ の変換に対して u_P, v_{-P} は不変である。そのため $\sum K_1 b_P^\dagger b_P + K_2 b_{-P}^\dagger b_{-P} = \sum (K_1+K_2) b_P^\dagger b_P$ とできるからである。

$$
\begin{aligned}
H &= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2}gn\sum_{P\neq 0}\left(\frac{mgn}{P^2}\right) \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[A(|u_P|^2+|v_{-P}|^2)+(2gn)u_Pv_{-P}\right]b_P^\dagger b_P \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[A|v_{-P}|^2+(gn)u_Pv_{-P}\right]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2}gn\sum_{P\neq 0}\left(\frac{mgn}{P^2}\right) \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[A\left(\frac{x+1}{2}-\frac{x-1}{2}\right)-(2gn)\frac{\sqrt{(x+1)(x-1)}}{2}\right]b_P^\dagger b_P \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[A\frac{x-1}{2}-(gn)\frac{\sqrt{(x+1)(x-1)}}{2}\right]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2}gn\sum_{P\neq 0}\left(\frac{mgn}{P^2}\right) \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[Ax-(gn)\sqrt{x^2-1}\right]b_P^\dagger b_P \\
&\quad + \frac{1}{2}\sum_{P\neq 0}\left[A(x-1)-(gn)\sqrt{x^2-1}\right]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2}gn\sum_{P\neq 0}\left(\frac{mgn}{P^2}\right) - \frac{1}{2}\sum_{P\neq 0}A \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[Ax-(gn)\sqrt{x^2-1}\right]b_P^\dagger b_P \\
&\quad + \frac{1}{2}\sum_{P\neq 0}\left[Ax-(gn)\sqrt{x^2-1}\right]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2}gn\sum_{P\neq 0}\left(\frac{mgn}{P^2}\right) - \frac{1}{2}\sum_{P\neq 0}A \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[A\sqrt{\frac{A^2}{A^2-(gn)^2}}-(gn)\sqrt{\frac{A^2}{A^2-(gn)^2}-1}\right]b_P^\dagger b_P \\
&\quad + \frac{1}{2}\sum_{P\neq 0}\left[A\sqrt{\frac{A^2}{A^2-(gn)^2}}-(gn)\sqrt{\frac{A^2}{A^2-(gn)^2}-1}\right]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H &= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2}gn\sum_{P\neq 0}\left(\frac{mgn}{P^2}\right) - \frac{1}{2}\sum_{P\neq 0}A \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[A\sqrt{\frac{A^2}{A^2-(gn)^2}} - (gn)\sqrt{\frac{A^2}{A^2-(gn)^2}-1}\right] b_P^\dagger b_P \\
&\quad + \frac{1}{2}\sum_{P\neq 0}\left[A\sqrt{\frac{A^2}{A^2-(gn)^2}} - (gn)\sqrt{\frac{A^2}{A^2-(gn)^2}-1}\right] \\
&= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2}gn\sum_{P\neq 0}\left(\frac{mgn}{P^2}\right) - \frac{1}{2}\sum_{P\neq 0}A \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[\frac{A^2}{\sqrt{A^2-(gn)^2}} - \frac{(gn)^2}{\sqrt{A^2-(gn)^2}}\right] b_P^\dagger b_P \\
&\quad + \frac{1}{2}\sum_{P\neq 0}\left[\frac{A^2}{\sqrt{A^2-(gn)^2}} - \frac{(gn)^2}{\sqrt{A^2-(gn)^2}}\right] \\
&= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2}gn\sum_{P\neq 0}\left(\frac{mgn}{P^2}\right) - \frac{1}{2}\sum_{P\neq 0}A \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\left[\sqrt{A^2-(gn)^2}\right] b_P^\dagger b_P \\
&\quad + \frac{1}{2}\sum_{P\neq 0}\left[\sqrt{A^2-(gn)^2}\right] \\
&= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2}\sum_{P\neq 0}\left(\frac{m(gn)^2}{P^2}\right) - \frac{1}{2}\sum_{P\neq 0}\left(\frac{P^2}{2m}+gn\right) \\
&\quad + \sum_{P\neq 0}\epsilon_{(P)} b_P^\dagger b_P \\
&\quad + \frac{1}{2}\sum_{P\neq 0}\epsilon_{(P)} \\
&= \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2}\sum_{P\neq 0}\left(\epsilon_{(P)} - \frac{P^2}{2m} - gn + \frac{m(gn)^2}{P^2}\right) + \sum_{P\neq 0}\epsilon_{(P)} b_P^\dagger b_P \\
&= E_{0(P)} + \sum_{P\neq 0}\epsilon_{(P)} b_P^\dagger b_P
\end{aligned}
$$

以上でハミルトニアンが対角化された事になる。変換後のハミルトニアンの特徴は、P ごとに基底エネルギーが異なり、また P ごとに準粒子 1 個のエネルギーが異なるところにある。

Appendix

Example において、

$$\begin{cases} a_P = u_P b_P + v^*_{-P} b^\dagger_{-P} \\ a_{-P} = \alpha b^\dagger_P + \beta b_{-P} \end{cases}$$

を仮定し、

$$\begin{cases} a_P = u_P b_P + v^*_{-P} b^\dagger_{-P} \\ a_{-P} = \alpha b_P + \beta^\dagger b_{-P} \end{cases}$$

を仮定しないのは、下の変換では $b^\dagger b_P, b^\dagger_{-P} b_{-P}$ の項が現れないので、どう α, β を取っても駄目だからである。

Takashi Inoue
http://www.persianblue.net/