Particle－Hole Conjugation

渡　辺　　宏（北大理）

（12月4日受理）

§1　はじめに

同種のFermi粒子の集団を記述する際、粒子そのものに着目する代りに、粒子の抜けた穴に着目した方が簡単なことがある。又、1粒子の量子状態の集合を適当に2つに分類して、その集合の1つは粒子に、他は穴に着目するのが都合のよいこともある。

このノートでは、粒子と穴の使い分けについて、occupation number 表示を用いて述べてみる。§2以下では、実際の定式化は粒子に着目して行こう。

occupation number 表示を扱うには、粒子の creation と annihilation の operator を用いるのが便利である。1つの粒子をjという状態に創るoperatorをa_j^+，Kという状態にある粒子を消すoperatorをa_Kと記すことにする。a_j^+とa_jとは互にhermitian conjugateである。これらa_j^+，a_Kなどについて次の交換関係が成立する。

$$a_j^+ a_K + a_K a_j^+ = \delta_{jK} \tag{1}$$

$$a_j^+ a_K^+ + a_K^+ a_j^+ = 0 \tag{2}$$

$$a_j a_K + a_K a_j = 0 \tag{3}$$

$a_j^+ a_j$というoperatorはjという状態にある粒子数に対応する即ち

$$a_j^+ a_j = n_j \tag{4}$$

と書く。(1)から

$$a_j a_j^+ = 1 - n_j \tag{5}$$

jという状態にある粒子を消すことは穴をjに創ることであり、Kという状

態に粒子を創ることは、Kにある穴を消すことである。粒子と穴に関するcreation と annihilation の operator を別々の記号で定義し、議論を別々に定式化して結果を物理的に解釈するという話の進め方もあるが、解釈にアイマイさが残る場合がある。例えば、電子の磁気能率は正孔では向きが逆になるか？　といつた疑問である。そこで§2以下ではも少し立ち入つた約束を定義し、粒子に関するoperator のめで定式化を進める。

§2　Shell

考えているFermi 粒子の1粒子のHamiltonian H が時間反転（Wigner の意味）に対して不変であるとする。その場合、Kramers の定理によつて、1粒子の状態jと、その時間反転した1粒子の状態 T_j とは同じエネルギーに縮退している。ここで T_j という状態はjの量子数の中で、時間反転で符号を変えるoperator に関係する量子数の符号を逆にして得られるものとする。Hがある変換の群に対して不変の場合は、その群に特徴的な必然的な縮退が生ずる。これはdue degeneracy とよばれている。時間反転と変換群に伴つて縮退している1粒子の状態の集合を"Shell"と定義する。1つのShell に属する状態の数をNとすると、Nは常に偶数である。

時間反転で関係つけられるjと T_j の状態ベクトル $|j\rangle$ と $|T_j\rangle$ は時間反転のoperator Kで次の式で関係つけられるとする。

$$K|j\rangle = \varepsilon_j |T_j\rangle, \quad j = 1, 2, \cdots N . \tag{6}$$

ここで位相因子 ε_j は絶対値1で、K^2 の1粒子状態に関する固有値が−1であるから

$$\varepsilon_j^* \varepsilon_{T_j} = -1 \quad 又は \quad \varepsilon_j = -\varepsilon_{T_j} \tag{7}$$

なる関係を満足しなければならない。例えば

$$\varepsilon_j = -\varepsilon_{T_j} = 1 \quad 又は \quad -i \tag{8}$$

のように選んでもよい。

§ 3 Complementary states

N個の1粒子状態から成る1つのShell を考えよう。このShellにn個の粒子が存在する系と、n個の穴（或いはN－n個の粒子）が存在する系とは、種々の点で類似している。例えばn粒子系の波動函数とn穴系の波動函数とか、又、行列要素や固有値などが極めて類似している場合がある。この類似性を見通しよく安定化するためにcomplementary state という概念を導入する。n個の1粒子状態 j，k，…，n が粒子により占められている状態$\Psi(j, k, \cdots, n)$と、N個の1粒子状態からT_j，T_k，…，T_n を除いたN－n個が粒子によつて占められている状態$\Psi([T_j, T_k, \cdots, T_k])$を互にcomplementary な状態と呼ぶ。（或いはconjugate な状態。）例えばshell に1つも粒子のない状態と、N個ある状態とはcomplementary である。このcomplementary な状態を、位相因子を含めて、一意に関係つけるoperator C を次の様に定義する。

$$C\,|\,0> = \varepsilon_1 \varepsilon_2 \cdots \varepsilon_{N/2}\, a_1^+ a_2^+ \cdots a_N^+ |\,0> \tag{9}$$

及び

$$C a_j^+ C^{-1} = \varepsilon_j^* a_{T_j} \quad , \qquad j = 1, 2, \cdots, N \tag{10}$$

ここで$|\,0>$は粒子が1つもない状態，$|\,N>$はN個ある状態の状態ベクトルである。便宜上、1，2，…，Nという名前は、j番目を時間反転した状態がN－j＋1 番目になるように約束してある。例えば$T_1 = N$．

(9)式の位相因子の積 $\varepsilon_1 \varepsilon_2 \cdots \varepsilon_{N/2}$ はCの時間反転に対する不変性と、C^2の固有値を以下に求めるために導入した。このようなCがunitary であることは容易に示される。

(10)の hermitian conjugate をとると

$$C\, a_j\, C^{-1} = \varepsilon_j\, a_{T_j}^+ \tag{11}$$

(7)を考慮して

$$C^2 a_j^+ C^{-2} = -a_j^+ \tag{12}$$

C^2を $|0>$に作用すると

$$C^2|0> = CCC^{-1}C|0> = (-1)^{N/2}|0> \tag{13}$$

C^2をn粒子の状態 $|n, r>$, rは量子数の組、に作用すると

$$C^2|n, r> = (-1)^{N/2-n}|n, r>. \tag{14}$$

ここで (12) ,(13)式を用いた。 (13)(14)からC^2の固有値は $(-1)^{N/2-n}$で与えられるから

$$C^2 = (-1)^{N/2-\underline{n}} \tag{15}$$

と書ける。ここで$\underline{n}$は粒子数operator で

$$\underline{n} = \sum_{j=1}^{N} a_j^+ a_j .$$

特に $n = N/2$ の時は

$$C^2 = 1 \tag{16}$$

となり、$|N/2, r>$ 又は-1 になるように出来る可能性を示している。このような選び方としてseniority scheme を挙げることが出来るが、ここでは立ち入らない。量子数の組rの内、物理的に観測される量に関係するものは、C と可換なoperator の固有値になつているものとする。次節で示すが、例えば1粒子型のoperator であれば時間反転で符号を変えるものということになる。

§4 Operator の分類

1粒子型operator Fはshell の中で、次の様に表わされる。

$$F = \sum_{j,K} <j|f|K> a_j^+ a_K \tag{17}$$

2粒子型operator G は

$$2G = \sum_{j,K,l,m} <jK|g|lm> a_j^+ a_K^+ a_m a_l \tag{18}$$

但し和はshell の中のN個の1粒子状態について行う。又$<jK|g|1m>=<K_j|g|m1>$.

Fがhermitian か anti-hermitian，又、時間反転で符号を変えるか変えないか、に従つて、Cとの交換関係は 表1 のように与えられる。

表 1

時間反転に対して	エルミート	反－エルミート
不 変	CF=−FC	CF = FC
符号変る	CF=FC	CF = −FC

この表ではscalar operator，即ちHを不変にする群に関しても時間反転に対しても不変な1粒子型operator は除いてある。このようなoperatorは<u>n</u>に比例することが容易に群論から知れる。

例えば$|n,r>$が角運動量の固有状態であれば$C|n,r>$もそうで、同じ固有値に属することになる。磁気能率はCと可換で、その向きは$|n,r>$と$C|n,r>$に関して同じとなる。

Gについては、一般には表1のような簡単な関係は得られないが

$$CGC^{-1} = G_0 + G_1 + G \tag{19}$$

のように書かれる。ここでG_0は定数，G_1は1粒子型operator.もしGが表1のいずれかのFの積の形に与えられれば

$$CGC^{-1} = G \tag{20}$$

となる。

もし(19)においてGがscalar であればG_1は<u>n</u>に比例する。

任意のoperator O の(N−n)粒子（即ちn穴）の状態に関する行列要素は

$$<N-n,r'|O|N-n,r> = <n,r'|C^{-1}OC|n,r> \tag{21}$$

と書けるから、$C^{-1}OC$のn粒子の状態$|nr>$に関する行列要素を計算すれ

ばよいことになる。N－nがnよりもはるかに大きい時は、(21)の関係は(N－n)粒子系の計算を簡単にするのに役に立つ。N－nがnに等しい時、即ち$n=N/2$の時は、そのような簡単化の代りに、有用なselection ruleが§5のように得られる。

§5′ $n = N/2$ の場合

$n=N/2$の場合、$|N/2, r\rangle$という状態をCの固有値に従つて2種類に分けることが出来ることを§3で述べた。Cの固有値が+1の状態をeven，−1である状態をoddと呼ぶことにする。

2粒子型のoperator Gがscalarの時は$n=N/2$の場合，(19)をCで再び変換して

$$G = G_0 + G_1 + C G C^{-1} \tag{22}$$

となる。ここで$C G_1 C^{-1} = G_1$になることを用いた。理由は$C \underline{n} C^{-1} = \underline{n}$となるから、(19)と(22)を比べて

$$G_0 + G_1 = 0$$

となり

$$C G C^{-1} = G \tag{23}$$

を得ら。即ち、scalarなGは$n=N/2$の場合Cと可換である。それ故GについてのSelection rule

$$\langle N/2, r', \text{even} \mid G \mid N/2, r, \text{odd} \rangle = 0 \tag{24}$$

をうる。そしてGの固有状態はやはりCに関してevenとoddの二種になる。

次に、Cと可換なFをeven, 反可換なFをoddと呼ぶと次のselection ruleをうる。

$$\langle N/2, r', \text{even} \mid F_{odd} \mid N/2, r, \text{even} \rangle = 0 \tag{25}$$

$$\langle N/2, r', \text{odd} \mid F_{even} \mid N/2, r, \text{even} \rangle = 0 \tag{26}$$

§ 6　2つのShell の場合

2つのShell I 及び II を考える場合は、夫々のShell について C_{I}, C_{II} を(9),(10)に従つて定義するとよい。

例えばIについては粒子に、IIについては穴に着目する時は、C_{II} のみを用いて、2つのShell の中で定義されたoperator O の行列要素について次の関係をうる。

$$
\begin{aligned}
&\langle n_{I}, N_{II}-n_{II}, r' \mid O \mid n_{I}, N_{II}, r\rangle \\
&=\langle n_{I}, n_{II}, r' \mid C_{II}^{-1} O\, C_{II} \mid n_{I}, n_{II}, r\rangle
\end{aligned}
\tag{27}
$$

2つ以上のShell への拡張は自面である。

§ 7　むすびに

以上の話では具体例を挙げなかつたけれど、実際に応用する際には、Shell を定義するHamiltonian を不変にする群，1粒子状態の時間反転に伴う位相因子 ε_j の選び方，$|n, r\rangle$ の r の選び方，といつた作業が必要である。又、粒子数を変えるようなoperator の行列要素など述べなかつたが、例えばproton と neutron を変換するようなHamiltonian が現れる場合にはC の定義を拡張する必要がある。