参考文献

1) T. Nishigama, Prog. Theor. Phys. 7 (1952), 417; 8 (1953), 655.

2) N. N. Bogoliubov and D. N. Zubarev, Zh. Eksp. i. Teor. Fiz. 28 (1955), 129.

3) E. Feenberg, Rev. Mod. Phys. 34 (1962), 686; Ann. Phys. 15 (1961), 266.

4) S. Sunakawa, S. Yamasaki, and T. Kebukawa, Prog. Theor. Phys. 41 (1969), 919.

5) D. K. Lee, Phys. Rev. A4 (1971), 1670.

6) P. Berdahl, Ph.D. Thesis, (Stan ford Univ. 1972).

7) M. Takahashi, Prog. Theor. Phys. 53 (1975), No.2.

8) T. Nishiyama, to be published.

9) R. F. Dashen and D. H. Sharp, Phys. Rev. 165 (1968), 1857.

10) M. Matsubara and H. Matsuda, Prog. Theor. Phys. 16 (1956), 569.

11) H. Nakano, Prog. Theor. Phys. 9 (1953), 33;
T. Nishigama, Prog. Theor. Phys. 5 (1950), 909.

12) M. Girardeau, J. Math. Phys. 1 (1960), 516.

13) P. Carruthers and M. M. Nieto, Rev. Mod. Phys. 40 (1968), 411.

Bose系におけるBogoliubov—Zubarev理論の妥当性について

阪大教養　高　橋　　実

§1. 序

二体力で相互作用をするスピンのないBose粒子系に対して単純な摂動計算を行うと多くの場合高次摂動項が発散をしてしまうという困難を招く。Bogoliubov と Zubarev[1] (BZ) はこの系のSchrödinger 方程式を密度変数で書き変え，新しい非エルミートなハミルトニアンを得た。また彼らはこのハミルトニアンを使い，基底状態エネ

ルギーを二次まで摂動計算を行った。幸運なことによほど特殊な二体力でない限り摂動項は二次までは収束するのである。高次も多分収束するであろうと期待されている。

我々は§2でBZハミルトニアンの導出には数学的に厳密でない点があることを指摘したい。§3でデルタ函数型相互作用をする一次元 Bose 多体系について二次まで実際にに基底状態エネルギーを計算し，これが Lieb と Liniger の厳密解と一致しないことを示す。

§2.　BZハミルトニアン

BZは Schrödinger 方程式

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}_1,\cdots,\mathbf{r}_N;t)=\left(-\sum_{i=1}^{N}\triangle_i+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}V(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)\right)\psi(\mathbf{r}_1,\cdots,\mathbf{r}_N;t)$$

$$V(\mathbf{r})=\frac{1}{\Omega}\sum_{\mathbf{k}}\nu(\mathbf{k})\,e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \tag{2.1a}$$

における粒子の座標変数 $\mathbf{r}_1,\cdots,\mathbf{r}_N$ を密度変数

$$\rho_{\mathbf{k}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}\qquad \mathbf{k}\neq 0 \tag{2.1b}$$

で変換した。簡単のため我々は $\hbar=2m=1$ と置く。結果は

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\{\rho_{\mathbf{k}}\};t)=\Big[\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\Big\{k^2\Big(-\frac{\partial^2}{\partial\rho_{\mathbf{k}}\,\partial\rho_{-\mathbf{k}}}+\rho_{\mathbf{k}}\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{k}}}\Big)+\frac{N}{2\Omega}\nu(\mathbf{k})(\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}}-1)$$

$$+\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2\neq 0}(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2)\,\rho_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2}\frac{\partial^2}{\partial\rho_{\mathbf{k}_1}\,\partial\rho_{\mathbf{k}_2}}+\frac{N^2\nu(0)}{2\Omega}\Big]\psi(\{\rho_{\mathbf{k}}\},t) \tag{2.1c}$$

である。ここで（2.1a）で記述される系の自由度は次元Ｘ粒子数であるのに，（2.1c）では変数の数は無限大になっている。したがって $\rho_{\mathbf{k}}$ の間には無限個の束縛条件があるはずである。しかしこれが互に独立であると考えて（2.1c）式を解き，この解に（2.1b）を代入すれば（2.1a）を満足する解 $\psi(\{\mathbf{r}_j\})$ が求められるはずである。変数の数をわざわざ増して微分方程式を解くことは実際には余り行われていないが，別に問題はないように思われる。

（2.1c）で

$$\psi = f\Psi \tag{2.2a}$$

$$f \equiv \exp\left(\frac{1}{4}\sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}\,\rho_{-\mathbf{k}}\right)$$

という変換を行うと $\rho_{\mathbf{k}}$, $\partial/\partial\rho_{\mathbf{k}}$ に関して二次の項は調和振動子の方程式と同じ形に変形され，最終的には

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(H_0 + \frac{1}{\sqrt{N}}H_1\right)\Psi \tag{2.3a}$$

$$H_0 = E_0^{(0)} + \sum_{\mathbf{k}\neq 0} (\mathbf{k}^2/\lambda_{\mathbf{k}})\, b_{\mathbf{k}}^{+} b_{\mathbf{k}} \tag{2.3b}$$

$$H_1 = \frac{1}{4}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\,\mathbf{k}+\mathbf{k}'\neq 0}\left(\frac{\lambda_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}}{\lambda_{\mathbf{k}}\lambda_{\mathbf{k}'}}\right)^{\frac{1}{2}}(\mathbf{k},\mathbf{k}')(b_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}+b_{-\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{+})$$
$$\left((1+\lambda_{\mathbf{k}})b_{-\mathbf{k}} + (\lambda_{\mathbf{k}}-1)b_{\mathbf{k}}^{+}\right)\times\left((1+\lambda_{\mathbf{k}'})b_{-\mathbf{k}'} + (\lambda_{\mathbf{k}'}-1)b_{\mathbf{k}'}^{+}\right) \tag{2.3c}$$

となる。ここで

$$E_0^{(0)} = \frac{N(N-1)}{2\Omega}\nu(0) + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\left(k^2/\lambda_{\mathbf{k}} - k^2 - \frac{N\nu(\mathbf{k})}{\Omega}\right), \tag{2.3d}$$

$$\lambda_{\mathbf{k}} = \sqrt{k^2/(k^2+2N\nu(\mathbf{k})/\Omega)}, \tag{2.3e}$$

$$b_{\mathbf{k}}^{+} = \sqrt{\lambda_{\mathbf{k}}}\,\frac{\partial}{\partial\rho_{-\mathbf{k}}} + \frac{1}{2\sqrt{\lambda_{\mathbf{k}}}}\rho_{\mathbf{k}}\ , \tag{2.3f}$$

$$b_{\mathbf{k}} = \sqrt{\lambda_{\mathbf{k}}}\,\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{k}}} + \frac{1}{2\sqrt{\lambda_{\mathbf{k}}}}\rho_{-\mathbf{k}}\ ,$$

$\rho_{\mathbf{k}}$ は独立変数であると考えるのであるから（2.3f）より

$$[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}^{+}] = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\ ,\quad [b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}] = [b_{\mathbf{k}}^{+}, b_{\mathbf{k}'}^{+}] = 0 \tag{2.4}$$

が得られる。H_0 の基底状態は調和振動子の解の積の形に書けるから，

$$\Psi_0 = C\exp\left(-\frac{1}{4}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{1}{\lambda_{\mathbf{k}}}\rho_{\mathbf{k}}\,\rho_{-\mathbf{k}}\right) \tag{2.5}$$

さてもし $b_{\mathbf{k}}$ と $b_{\mathbf{k}}^{+}$ がHermite 共役ならば，すなわち，

$$(b_{\mathbf{k}}\Psi, \Phi) = (\Psi, b_{\mathbf{k}}^{+}\Phi) \tag{2.6}$$

が任意の波動函数 Ψ と Φ についてなりたっていれば，状態

$$\Psi(\{n_{\mathbf{k}}\}) = \{\prod_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{n_{\mathbf{k}}!}}(b_{\mathbf{k}}^{+})^{n_{\mathbf{k}}}\}\Psi_0 \tag{2.7}$$

は完全正規直交系をなし，摂動展開が可能になる。基底状態エネルギーに対しては

$$E_0 = E_0^{(0)} + \frac{1}{\sqrt{N}}E_0^{(1)} + \frac{1}{N}E_0^{(2)} + \cdots\cdots \tag{2.8a}$$

ここで $E_0^{(0)}$ は (2.3d) で与えられ，奇数次の項はすべて 0 である。すなわち，

$$E_0^{(2n+1)} = 0 \tag{2.8b}$$

$E_0^{(2)}$ は

$$\begin{aligned} E_0^{(2)} = -\frac{1}{8}\sum_{\mathbf{p},\mathbf{q},\mathbf{p}+\mathbf{q}\neq 0} & \lambda_{\mathbf{p}}\lambda_{\mathbf{q}}\lambda_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}(\mathbf{pq})(1+\lambda_{\mathbf{p}}^{-1})(1+\lambda_{\mathbf{q}}^{-1}) \\ & \{(\mathbf{pq})(1-\lambda_{\mathbf{p}}^{-1})(1-\lambda_{\mathbf{q}}^{-1}) - (\mathbf{p},\mathbf{p}+\mathbf{q})(1-\lambda_{\mathbf{p}}^{-1})(1-\lambda_{\mathbf{p}+2}^{-1}) \\ & - (\mathbf{q},\mathbf{p}+\mathbf{q})(1-\lambda_{\mathbf{q}}^{-1})(1-\lambda_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{-1})\}/(p^2/\lambda_{\mathbf{p}}+q^2/\lambda_{\mathbf{q}}+(\mathbf{p}+\mathbf{q})^2/\lambda_{\mathbf{p}+2}), \end{aligned} \tag{2.8c}$$

で与えられる。(2.6) が成り立つかどうかを論ずるまえに二つの波動函数の 内積がどう定義されるべきかを考えよう。$\{\mathbf{r}_j\}$ 空間において内積は

$$(\phi,\psi) = \int\phi^*(\mathbf{r}_1,\cdots,\mathbf{r}_N)\psi(\mathbf{r}_1,\cdots,\mathbf{r}_N)\,d\mathbf{r}_1\cdots d\mathbf{r}_N, \tag{2.9a}$$

によって定義された。したがって $\{\rho_{\mathbf{k}}\}$ 空間における内積は (2.1b), (2.2a), (2.2b) より

$$\begin{aligned} (\Phi(\{\rho_{\mathbf{k}}\}), \Psi(\{\rho_{\mathbf{k}}\})) = & \int\Phi^*(\{\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N} e^{i\mathbf{kr}_j}\})\Psi(\{\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N} e^{i\mathbf{kr}_j}\}) \\ & \times f^2(\{\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N} e^{i\mathbf{kr}_j}\})\,d\mathbf{r}_1\cdots d\mathbf{r}_N \end{aligned} \tag{2.9b}$$

で定義されなければならない。この定義から $\rho_{\mathbf{k}}$ と $\rho_{-\mathbf{k}}$ がエルミット共役であることは自明である。$\partial/\partial\rho_{\mathbf{k}}$ と $-\partial/\partial\rho_{-\mathbf{k}}$ がエルミット共役であれば b_k と b_k^+ が共役であるという証明は完結するが，実はそうはならない。例として

$$\Phi = \exp\left(-\frac{1}{4}\sum_{\mathbf{k}'\neq\mathbf{k},-\mathbf{k}}\frac{1}{\lambda_{\mathbf{k}'}}\rho_{\mathbf{k}'}\rho_{-\mathbf{k}'}\right),\quad \Psi = \rho_{-\mathbf{k}}\Phi \tag{2.10a}$$

なる波動函数を考えて見よう，

$$\left(\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{k}}}\Phi, \Psi\right) = 0 \tag{2.10b}$$

$$\left(\Phi, -\frac{\partial}{\partial\rho_{-\mathbf{k}}}\Psi\right) = -(\Phi,\Phi) \neq 0 \tag{2.10c}$$

であることが示され，$\partial/\partial\rho_{\mathbf{k}}$ と $-\partial/\partial\rho_{-\mathbf{k}}$ は共役になっていないことがわかる。もし我々が内積の定義を次のように変更すれば両者は共役になる

$$[\Phi,\Psi] = \int\Phi^*(\{\rho_{\mathbf{k}}\})\,\Psi(\{\rho_{\mathbf{k}}\})\,\mathop{\Pi'}_{\mathbf{k}}\,d\rho_{\mathbf{k}}^C\,d\rho_{\mathbf{k}}^S \tag{2.11}$$

ここで $\rho_{\mathbf{k}}^C \equiv \mathrm{Re}\,\rho_{\mathbf{k}}$，$\rho_{\mathbf{k}}^S \equiv \mathscr{I}m\,\rho_{\mathbf{k}}$，$\mathop{\Pi'}_{\mathbf{k}}$ は半球上にある $\mathbf{k}$ を省く積を意味するものとする。(例えば $k_Z > 0$)。すなわち BZ は暗黙の中に内積が (2.11) で与えられると仮定しているのである。したがって BZ のハミルトニアンから求められた波動函数 $\psi(\{\mathbf{r}_j\})$ は Schrödinger 方程式 (2.1a) を満足するであろうと考えられる。しかし $\int\psi^*\psi\,d\mathbf{r}_1\cdots d\mathbf{r}_N$ が有限になる保証がないので物理的に無意味な解になっている可能性がある。

§ 3. 厳密解との比較

さて一次元でデルタ函数型相互作用をする Bose 粒子系を考察しよう。ここで $\nu(\mathbf{k}) = 2c$，系の長さを L とする。(2.8a)，(2.8b)，(2.8c) を使って，

$$\lim_{N,L\to\infty}\frac{E_0^{(0)}}{L} = n^3\left(\gamma - \frac{4}{3\pi}\gamma^{\frac{3}{2}}\right), \tag{3.1a}$$

$$\lim_{N,L\to\infty}\frac{E_0^{(0)}}{LN} = -n^3\gamma^2\left(\frac{1}{\pi^2} - \frac{1}{12}\right) = -0.01798785\,n^3\gamma^2, \tag{3.1b}$$

ここで $n \equiv N/L$，$\gamma \equiv c/n$ である。（3.1b）は単に二重積分を求めれば得られるが詳細は参考文献3を参照されたい。またBZハミルトニアンの高次摂動項は次元解析により

$$\lim_{N,L} \frac{E_0^{(2j)}}{LN^j} = n^3 \gamma^{(j+3)/2} \times \text{constant} , \qquad j = 1, 2, \cdots \tag{3.1c}$$

の形になることがわかる。すなわちこの系に対してBZハミルトニアンは高密度展開を与えているのである。$e_0 \equiv E_0/L$ とすれば，

$$e_0 n^{-3} = \gamma - \frac{4}{3\pi}\gamma^{\frac{3}{2}} - \left(\frac{1}{\pi^2} - \frac{1}{12}\right)\gamma^2 + 0(\gamma^{\frac{5}{2}}) \tag{3.2}$$

一方Lieb と Liniger（LL）は熱力学的極限（$N, L \to \infty$）で e_0 と n は

$$e_0 = \int_{-B}^{B} k^2 f(k)dk, \quad n = \int_{-B}^{B} f(k)dk, \tag{3.3a}$$

で与えられることを示した。ここで $f(k)$ は

$$f(k) - \int_{-B}^{B} \frac{1}{\pi} \cdot \frac{c f(k')dk'}{c^2 + (k-k')^2} = \frac{1}{2\pi} \tag{3.3b}$$

を満足する函数である。パラメーターB が大きい時 e_0 と nを展開しB を消去すれば e_0 の高密度展開が得られるはずであるが，これを解析的に行うことはあまり成功していない。LLは数値的に $e_0 n^{-3}$ は $\gamma \ll 1$ のとき $\gamma - 4\gamma^{\frac{3}{2}}/3\pi$ で与えられることを示した。我々は次の項を求めるため e_0 と nを数値的に計算し，$\{e_0 n^{-3} - (\gamma - 4\gamma^{\frac{3}{2}}/3\pi)\}\gamma^{-2}$を $\sqrt{\gamma}$ の函数として図1にプロッ

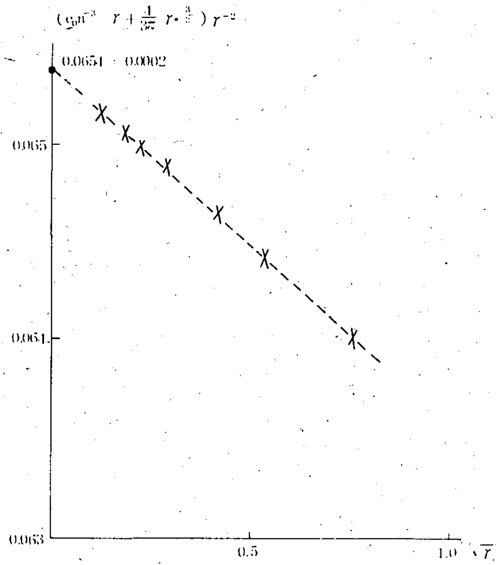

図1　$(e_0 n^{-3} - \gamma + \frac{4}{3\pi}\gamma^{\frac{3}{2}})\gamma^{-2}$

トした。その結果 γ^2 の係数として 0.0654 ± 0.0002 を得た。すなわち

$$e_0 n^{-3} = \gamma - \frac{4}{3\pi}\gamma^{\frac{3}{2}} + 0.0654\gamma^2 + O(\gamma^{\frac{5}{2}}) \tag{3.4}$$

この γ^2 の係数の値は BZ ハミルトニアンの結果 − 0.01798785 と大きく食違っている。

前節で指摘した BZ ハミルトニアンの導出における数学的矛盾も合わせて考えるならば BZ ハミルトニアンは正確な Bose 系の記述ではないと考えられる。

また密度や位相や速度のような集団変数で Bose 系を記述する理論として，砂川，山崎，発生川による理論； correlated basis function の方法，西山理論等があるがこれらの関連については参考文献 3 を参照されたい。

参 考 文 満

1) N.N.Bogoliubov and D.N.Zubarev, Sov. Phys. 1 (1955), 83; ZETF 28 (1955), 129.

2) E.H.Lieb and W.Liniger, Phys. Rev. 130 (1963), 1605.

3) M.Takahashi (preprint) “On the Validity of the Collective Variable Description of Bose systems”, Prog. Theor. Phys. 53, No 2 に掲載与定