



研究論文

微分形による量子力学的期待値導出について

近藤 慎一郎^{1*}, 近藤 龍史², 近藤 篤史³, 吉村 一良^{4,5}

¹長崎大学工学部材料工学科, 〒852-8521 長崎市文教町 1-14.

²住友商事グループ, 鈴木薬局, 〒362-0014 上尾市本町 5-13-27.

³東京大学大学院医学系研究科, 〒113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1.

⁴京都大学大学院理学研究科化学専攻, 〒606-8502 京都市左京区北白川追分町.

⁵京都大学大学院工学研究科物質エネルギー化学専攻, 〒615-8510 京都市西京区京都大学桂.

On the Derivation of Quantum Mechanical Expectations in the Differential Form

Shin-ichiro KONDO^{1*}, Tatsushi KONDO², Atsushi KONDO³ and Kazuyoshi YOSHIMURA⁴

¹Dept. Materials Science and Engineering, Nagasaki University, 1-14 Bunkyo-machi, Nagasaki 852-8521, Japan.

²Sumitomo Corporation, Suzuki Pharmacy, 5-13-27 Honmachi, Ageo 362-0014, Japan.

³Graduate School of Medicine, University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0033, Japan.

⁴Dept. Chemistry, Graduate School of Science, Kyoto University, Oiwake-cho, Kitashirakawa, Sakyo-ku, Kyoto 606-8502, Japan.

⁵Department of Energy & Hydrocarbon Chemistry, Graduate School of Engineering, Kyoto University, Kyoto-Daigaku Katsura, Nishikyo-ku, Kyoto 615-8510, Japan.

Received September 5, 2023; Revised October 10, 2023; Accepted October 12, 2023; J-STAGE Advance Published date: October 24, 2023

ABSTRACT

Usually, expected values for various physical quantities, such as the number of electrons occupying certain states or the Coulomb interaction between different states of electrons, can be expressed in terms of integrals. In contrast, our method, based on differential forms, shows that expected values can be obtained by averaging over time. To confirm the validity of our method, we prepare the two cases: one is a very simple case with no many-body interaction, and the other is the case where the many-body term is included (the simplest Anderson Hamiltonian). Regarding the simple case without inclusion of many-body term, we prove analytically that the number of electrons occupying any state derived from our method is equivalent to the analytical one evaluated from the Green's function method. When the many-body term is included, our results show good numerical agreement with the analytical ones derived from the Green's function method. By the two cases, the calculation of expected values based on our method is considered valid.

KEY WORDS

many-body problem, differential forms, eigen state, expected values, Green's function

1 諸 言

量子力学に於いては、多体問題の解明は極めて重要である。たとえば多体問題が密接に関与する事例として、磁性¹⁻²⁵⁾や高温超伝導²⁶⁻⁴⁰⁾を挙げることができる。また超流動⁴¹⁻⁴⁷⁾などにも根底に多体問題が関与している。

我々は、このような多体問題に対して連立微分方程式による解法を提唱している⁴⁸⁻⁵⁰⁾。この方法は、ハミルトニアンが時

間依存を含む場合 ($\hat{H}(t)$) について Heisenberg の運動方程式から出発し、系の挙動を連立微分方程式で表現する^{48,51-55)}。

なお、量子力学で一番始原的な方程式 (1.1) 式からも同じ結果が導出される^{49,50)}

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi = \hat{H}(t) \Psi \quad (1.1)$$

またフェルミ粒子系の場合、多体項が存在しても有限個の連立微分方程式で表現出来、従来用いられたグリーン関数法と著しい対比をなす。

本来 この方法は表面に於けるイオンや原子の中性化確率やイオン化率を求めるために用いられたものである⁵¹⁻⁵⁵⁾。即

* Corresponding author, E-mail: kondou@nagasaki-u.ac.jp

本論文は CC BY-NC-ND ライセンスによって許諾されています。

ライセンスの内容を知りたい方は、

https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/deed.ja でご確認ください。

ち非定常状態解析のために行ったものである。しかし定常状態での解析に於いても有効性は確認されているが^{48,50)}、微分形による時間平均値が量子力学的期待値と合致するかについては十分な議論はなされていない。

本来 量子力学的期待値は積分の形をとる。グリーン関数法でも量子力学的期待値は積分の形をとることは周知の事実である。我々の提唱する計算方法では波動関数の時間平均が量子力学的期待値を表しているという主張である。正反対の微分形で量子力学的期待値が導出できるか否かを議論する。

ハミルトニアンが時間変化しない場合、始状態がハミルトニアンの固有状態であれば任意の物理量は時間に対して、一定値を示し容易に期待値が求められる。しかし始状態を固有状態として設定することが計算上困難な場合は、任意の物理量の時間発展は振動する場合がある。そのような状況において時間変化の平均値と量子力学的期待値との関連について考察を行う。

2 理 論

最初にハミルトニアン \hat{H} が時間依存を含む場合 ($\hat{H}(t)$) の Schrödinger の波動方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H}(t) |\psi\rangle \quad (2.1)$$

から出発する。ここで、 $|\psi\rangle$ は時刻 t での系の波動関数である。(2.1) 式より

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi | = \langle \psi | \hat{H}(t) \quad (2.2)$$

が成立する。次に任意の演算子 \hat{F} の時刻 t での期待値 $F(t)$ は以下の様に定義される。

$$F(t) = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle \quad (2.3)$$

次に期待値 $F(t)$ の時間発展を見るため、時間微分を考える。Schiff⁵⁶⁾によれば、 $F(t)$ の時間微分は次のように与えられる。

$$\frac{d}{dt} F(t) = \frac{d}{dt} \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle = \left\{ \frac{d}{dt} \langle \psi | \right\} \hat{F} | \psi \rangle + \langle \psi | \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \hat{F} \right\} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{F} \left\{ \frac{d}{dt} | \psi \rangle \right\} \quad (2.4)$$

(2.4) 式に (2.1) 及び (2.2) 式の結果を代入すると、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle &= -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi | \hat{H}(t) \hat{F} | \psi \rangle + \langle \psi | \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \hat{F} \right\} | \psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | \hat{F} \hat{H}(t) | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | [\hat{F}, \hat{H}(t)] | \psi \rangle + \langle \psi | \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \hat{F} \right\} | \psi \rangle \end{aligned} \quad (2.5)$$

ここで、我々は演算子 \hat{F} 自体は時間依存性が無い、即ち

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{F} = 0 \quad (2.6)$$

を想定しているので、(2.5) 及び (2.6) 式より期待値 $F(t)$ の時間発展は、以下の様に表される。

$$\frac{d}{dt} F(t) = \frac{d}{dt} \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | [\hat{F}, \hat{H}(t)] | \psi \rangle \quad (2.7)$$

この (2.7) 式を基に一階の連立微分方程式が形成され、初期値が与えられれば、それによって期待値 $F(t)$ の時間発展を数的に求めることができる。(2.7) 式を見てわかる様に、系

のハミルトニアンが時間依存性を有する非定常状態での解析でも時間発展を計算出来る。但し注意したい点がある。非定常状態では (2.7) 式を基に一階の連立微分方程式を作成し、初期値をその物理的状況に対応した値を代入、その後の系の時間発展をそのまま解析すれば物理量を求めることが出来る。しかし定常状態の解析では、いきなり初期値を代入しても基底状態の期待値は求められない。それについて考察を行ってみよう。今系のハミルトニアン \hat{H} が以下の形で表現されるとする。

$$\hat{H} = E_k \hat{C}_k^+ \hat{C}_k + E_a \hat{C}_a^+ \hat{C}_a + V_{ka}(t) \hat{C}_k^+ \hat{C}_a + V_{ak}(t) \hat{C}_a^+ \hat{C}_k \quad (2.8)$$

\hat{C}_k^+ , \hat{C}_k は波数 k の電子の生成及び消滅演算子である。 \hat{C}_a^+ , \hat{C}_a は状態 a の電子の生成及び消滅演算子である。 E_k 及び E_a は、波数 k の電子のエネルギー及び状態 a の電子のエネルギー、 $V_{ka}(t)$ 及び $V_{ak}(t)$ はそれぞれ時刻 t での状態 k から状態 a 及び状態 a から状態 k への転送行列である。そこで (2.7) 式を (2.8) 式のハミルトニアンに適用させると以下の連立微分方程式を得る^{48,50)}。

$$\frac{d}{dt} n_{aa}(t) = \frac{1}{i\hbar} V(t) (n_{ak}(t) - n_{ka}(t)) \quad (2.9)$$

$$\frac{d}{dt} n_{ak}(t) = \frac{1}{i\hbar} \{ -V(t) n_{kk}(t) + (E_k - E_a) n_{ak}(t) + V(t) n_{aa}(t) \} \quad (2.10)$$

$$\frac{d}{dt} n_{kk}(t) = \frac{1}{i\hbar} V(t) (n_{ka}(t) - n_{ak}(t)) \quad (2.11)$$

$$\text{ここで } V_{ak}(t) = V_{ka}(t) = V(t) \quad (2.12)$$

とした。なお $n_{ij}(t) \equiv \langle \psi(t) | \hat{C}_i^+ \hat{C}_j | \psi(t) \rangle = \langle \psi | \hat{C}_i^+ \hat{C}_j | \psi \rangle$ である。ところで定常状態ではハミルトニアンは時間依存性を示さないの

$$V(t) = V_0 \quad (2.13)$$

と設定できる。上式のもとで始状態 ($t=0$) に於いて

$$n_{aa}(0) = n_{ak}(0) = 0, \quad n_{kk}(0) = 1 \quad (2.14)$$

の場合を考える。始状態では、状態 a には電子は存在せず、波数 k の電子だけが存在することを表している。このような始状態のもとで連立微分方程式 (2.9)-(2.11) を数的に解いて得られる $n_{aa}(t)$ の時間平均値は $V_0 = 0$ の場合を除き、基底状態の期待値にはならない。それは次のように解釈できる。まず (2.13) 式の条件下での定常状態に於ける固有状態 $|\phi_e\rangle$ は

$$\hat{H}_0 |\phi_e\rangle = E_0 |\phi_e\rangle \quad (2.15)$$

$$\hat{H}_0 = E_k \hat{C}_k^+ \hat{C}_k + E_a \hat{C}_a^+ \hat{C}_a + V_0 (\hat{C}_k^+ \hat{C}_a + \hat{C}_a^+ \hat{C}_k) \quad (2.15)'$$

と表現できる。ここで E_0 は固有状態 $|\phi_e\rangle$ の固有値である。(2.15) 及び (2.15)' より固有関数は二つ存在し、それぞれを $|\phi_e^{(1)}\rangle$ 及び $|\phi_e^{(2)}\rangle$ とすれば

$$|\phi_e^{(1)}\rangle = \alpha^{(1)} |\phi_a^0\rangle + \beta^{(1)} |\phi_k^0\rangle, \quad |\phi_e^{(2)}\rangle = \alpha^{(2)} |\phi_a^0\rangle + \beta^{(2)} |\phi_k^0\rangle \quad (2.16)$$

$$\text{但し } |\phi_a^0\rangle \equiv \hat{C}_a^+ |\text{VAC}\rangle, \quad |\phi_k^0\rangle \equiv \hat{C}_k^+ |\text{VAC}\rangle \quad (2.16)'$$

の形で表される ($|\text{VAC}\rangle$ は真空状態). ここで

$$\alpha^{(1)} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\theta^2 + \frac{\theta}{x}}}, \beta^{(1)} = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{1}{\theta x}\right)}, \alpha^{(2)} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\theta^2 - \frac{\theta}{x}}}, \beta^{(2)} = -\sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{1}{\theta x}\right)} \quad (2.17)$$

$$\text{但し } \theta = \sqrt{4+x^2}, x = V_0 / (E_k - E_a) \quad (2.17)'$$

である. $|\phi_e^{(1)}\rangle$ 及び $|\phi_e^{(2)}\rangle$ の固有値を $E_0^{(1)}$ 及び $E_0^{(2)}$ とすれば,

$$E_0^{(1)} = (E_a + E_k + \sqrt{D})/2, E_0^{(2)} = (E_a + E_k - \sqrt{D})/2, D = (E_a - E_k)^2 + 4V_0^2 \quad (2.18)$$

である. ところで(2.16)式を行列で表現すると

$$\begin{pmatrix} |\phi_e^{(1)}\rangle \\ |\phi_e^{(2)}\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha^{(1)} & \beta^{(1)} \\ \alpha^{(2)} & \beta^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\phi_a^0\rangle \\ |\phi_k^0\rangle \end{pmatrix} = \mathbf{\Lambda} \begin{pmatrix} |\phi_a^0\rangle \\ |\phi_k^0\rangle \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

となる. これより

$$\begin{pmatrix} |\phi_a^0\rangle \\ |\phi_k^0\rangle \end{pmatrix} = \mathbf{\Lambda}^{-1} \begin{pmatrix} |\phi_e^{(1)}\rangle \\ |\phi_e^{(2)}\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_a^{(1)} & b_a^{(2)} \\ b_k^{(1)} & b_k^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\phi_e^{(1)}\rangle \\ |\phi_e^{(2)}\rangle \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

(2.17), (2.19) 及び (2.20) 式より

$$b_a^{(1)} = -\beta^{(2)}, b_a^{(2)} = \beta^{(1)}, b_k^{(1)} = \alpha^{(2)}, b_k^{(2)} = -\alpha^{(1)} \quad (2.21)$$

である.

次にこれらを基に, 波動関数 $\psi(t)$ の時間変化について考察しよう. (2.14) 式で表される始状態では, (2.14) 及び (2.20) 式より

$$|\psi(0)\rangle = \hat{C}_k^+ |\text{VAC}\rangle = |\phi_k^0\rangle = b_k^{(1)} |\phi_e^{(1)}\rangle + b_k^{(2)} |\phi_e^{(2)}\rangle \quad (2.22)$$

と表される. よって波動関数 $\psi(t)$ は, 定常状態より以下のように表現される.

$$|\psi(t)\rangle = \exp(-i\hat{H}_0 t / \hbar) |\phi_k^0\rangle = b_k^{(1)} \exp(-i\hat{H}_0 t / \hbar) |\phi_e^{(1)}\rangle + b_k^{(2)} \exp(-i\hat{H}_0 t / \hbar) |\phi_e^{(2)}\rangle \quad (2.23)$$

$|\phi_e^{(1)}\rangle$ 及び $|\phi_e^{(2)}\rangle$ は固有状態なので (2.18) 及び (2.23) 式より

$$|\psi(t)\rangle = b_k^{(1)} \exp(-iE_0^{(1)} t / \hbar) |\phi_e^{(1)}\rangle + b_k^{(2)} \exp(-iE_0^{(2)} t / \hbar) |\phi_e^{(2)}\rangle \quad (2.24)$$

これより $n_{aa}(t)$ は

$$n_{aa}(t) = \langle \psi(t) | \hat{C}_a^+ \hat{C}_a | \psi(t) \rangle = \frac{2}{\theta^2} \left(1 - \cos\left(\frac{V_0 \theta}{\hbar} t\right)\right) \quad (2.25)$$

(2.25) 式の時間平均をとると, 状態 a の占有数 $\langle \hat{C}_a^+ \hat{C}_a \rangle$ は,

$$\langle n_{aa}(t) \rangle = \langle \hat{C}_a^+ \hat{C}_a \rangle = \frac{2}{\theta^2} = \frac{2x^2}{1+4x^2} \quad (2.26)$$

ところで Green 関数の解析結果より $\langle \hat{C}_a^+ \hat{C}_a \rangle$ は

$$\langle \hat{C}_a^+ \hat{C}_a \rangle = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1+4x^2}}\right) \quad (2.27)$$

で与えられている⁴⁸⁾. (2.14) 式に示すように始状態では \mathbf{k} 状態にのみ電子が占有されている. それらの状況で, $V(t) = V_0$ ($\neq 0$) とすれば, (2.9)-(2.11) 式から導出される $n_{aa}(t)$ の時間平均値は, (2.26) 及び (2.27) 式より状態 a の占有数 $\langle \hat{C}_a^+ \hat{C}_a \rangle$ に

一致しない. 一致しない理由は始状態が, (2.15)' 式で表されるハミルトニアン固有状態ではないことに起因している.

ところで, これまでの研究⁴⁸⁾ より

$$V(t) = V_0 t / t_c \quad 0 \leq t \leq t_c \quad V(t) = V_0 \quad t \geq t_c \quad (2.28)$$

と設定すれば, 状態 a の占有数 $\langle \hat{C}_a^+ \hat{C}_a \rangle$ は Green 関数の解析から導出される (2.27) 式と数値的に一致することが確認されている⁴⁸⁾. なお $t_c \sim 300$ 程度の値である. (2.28) 式に見るように $t=0$ では $V(t)=0$ であり, その場合には始状態は固有状態になり, それによって Green 関数の解析結果と合致すると推察される. 物理的には無摂動状態から連続的に緩慢に摂動状態へ推移し, それを解析することで物理量の量子力学的期待値が得られるものと察せられるが, それについて解析的な見地から考えてみよう. まず (2.8) 式で表現されるハミルトニアンについて波動関数 $\psi(t)$ は以下のように表せる.

$$|\psi(t)\rangle = \alpha(t) |\phi_a^0\rangle + \beta(t) |\phi_k^0\rangle \quad (2.29)$$

(2.29) 式を (2.1) 式へ代入すると, 以下の関係式が得られる. なお (2.12) 式に示すように $V_{ak}(t) = V_{ka}(t) = V(t)$ とした. (2.1) 式を適用させると

$$\frac{d}{dt} \alpha(t) = \frac{1}{i\hbar} \{E_a \alpha(t) + V(t) \beta(t)\} \quad (2.30)$$

$$\frac{d}{dt} \beta(t) = \frac{1}{i\hbar} \{V(t) \alpha(t) + E_k \beta(t)\} \quad (2.31)$$

(2.14) 式の始状態より, $\alpha(0) = 0, \beta(0) = 1$ である. なお (2.29) 式より $n_{aa}(t) = |\alpha(t)|^2$ である. 次に $t = t_c$ における $\alpha(t)$ 及び $\beta(t)$ をそれぞれ α_c 及び β_c とする. すると (2.29) 式より

$$\begin{aligned} |\psi(t_c)\rangle &= \alpha_c |\phi_a^0\rangle + \beta_c |\phi_k^0\rangle \\ &= \alpha_c (b_a^{(1)} |\phi_e^{(1)}\rangle + b_a^{(2)} |\phi_e^{(2)}\rangle) + \beta_c (b_k^{(1)} |\phi_e^{(1)}\rangle + b_k^{(2)} |\phi_e^{(2)}\rangle) \\ &= \gamma^{(1)} |\phi_e^{(1)}\rangle + \gamma^{(2)} |\phi_e^{(2)}\rangle \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$\text{ここで } \gamma^{(1)} = \alpha_c b_a^{(1)} + \beta_c b_k^{(1)}, \gamma^{(2)} = \alpha_c b_a^{(2)} + \beta_c b_k^{(2)} \quad (2.32)'$$

(2.28) 式より $t \geq t_c$ では $V(t) = V_0$ より定常状態であるので, (2.15)' のハミルトニアンを用いて

$$|\psi(t)\rangle = \exp(-i\hat{H}_0(t-t_c)/\hbar) |\psi(t_c)\rangle \quad (2.33)$$

(2.32) 及び (2.33) 式より, $t \geq t_c$ で

$$|\psi(t)\rangle = \gamma^{(1)} \exp(-iE_0^{(1)}(t-t_c)/\hbar) |\phi_e^{(1)}\rangle + \gamma^{(2)} \exp(-iE_0^{(2)}(t-t_c)/\hbar) |\phi_e^{(2)}\rangle \quad (2.34)$$

よって (2.34) 式より

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \hat{C}_a^+ \hat{C}_a | \psi(t) \rangle &= n_{aa}(t) = |\gamma^{(1)}|^2 \langle \phi_e^{(1)} | \hat{C}_a^+ \hat{C}_a | \phi_e^{(1)} \rangle + |\gamma^{(2)}|^2 \langle \phi_e^{(2)} | \hat{C}_a^+ \hat{C}_a | \phi_e^{(2)} \rangle \\ &+ 2 \text{Re}[(\gamma^{(1)})^* \gamma^{(2)} \langle \phi_e^{(1)} | \hat{C}_a^+ \hat{C}_a | \phi_e^{(2)} \rangle] \cos\left(\frac{\sqrt{D}}{\hbar}(t-t_c)\right) \\ &- 2 \text{Im}[(\gamma^{(1)})^* \gamma^{(2)} \langle \phi_e^{(1)} | \hat{C}_a^+ \hat{C}_a | \phi_e^{(2)} \rangle] \sin\left(\frac{\sqrt{D}}{\hbar}(t-t_c)\right) \end{aligned} \quad (2.35)$$

ところで (2.35) 式 左辺第 3 及び第 4 項は時間平均をとれば 0 になるので, $n_{aa}(t)$ の時間平均を $\langle n_{aa}(t) \rangle_{\text{AVE}}$ とすれば

$$\begin{aligned} \langle n_{aa}(t) \rangle_{\text{AVE}} &= |\gamma^{(1)}|^2 \langle \phi_e^{(1)} | \hat{C}_a^+ \hat{C}_a | \phi_e^{(1)} \rangle + |\gamma^{(2)}|^2 \langle \phi_e^{(2)} | \hat{C}_a^+ \hat{C}_a | \phi_e^{(2)} \rangle \\ &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{2x(\alpha_c \beta_c^* + \alpha_c^* \beta_c) + 1 - 2|\alpha_c|^2}{1 + 4x^2} \right) \end{aligned} \quad (2.36)$$

次に α_c 及び β_c について考えてみる。(2.30) 及び (2.31) 式から, $\alpha(t)$ もしくは $\beta(t)$ のみの微分方程式を作成する場合 2 階の常微分方程式が得られるが, (2.28) 式が示すように $0 \leq t \leq t_c$ では $V(t)$ は時間に比例するので係数が複素数になり解析的な解を示すことは極めて難しい. そこでこれらの難点を避けるために $0 \leq t \leq t_c$ で $V(t)$ が以下のように表せるとしよう.

$$\begin{aligned} t_n \leq t < t_{n+1} \quad V(t) &= \frac{V_0}{N-1} n = \tilde{V}(n) \\ \text{但し } t_j &= \frac{t_c}{N} j \quad j = 0, 1, 2, \dots, N \end{aligned} \quad (2.37)$$

(2.37) 式を見て判るように, $V(t) = V_0 t/t_c$ を step 関数の線形結合で近似したものであるが, これによって解析的な値が導出できる. ここで分割数 N を極めて大きくとれば $V(t) = V_0 t/t_c$ として扱うことができる.

(2.37) 式で示すように $t_n \leq t < t_{n+1}$ では $V(t)$ は定数なので (2.30) 及び (2.31) 式より

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{i\hbar} \begin{pmatrix} E_a & \tilde{V}(n) \\ \tilde{V}(n) & E_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

次に新しく $\tilde{\alpha}(t)$ 及び $\tilde{\beta}(t)$ を導入し, それらが $\alpha(t)$, $\beta(t)$ の線形結合で表させるとして

$$\begin{pmatrix} \tilde{\alpha}(t) \\ \tilde{\beta}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Gamma_{11}(n) & \Gamma_{12}(n) \\ \Gamma_{21}(n) & \Gamma_{22}(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} = \Gamma(n) \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} \quad (2.39)$$

(2.38) 及び (2.39) 式より

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \tilde{\alpha}(t) \\ \tilde{\beta}(t) \end{pmatrix} = \Gamma(n) \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{i\hbar} \Gamma(n) \begin{pmatrix} E_a & \tilde{V}(n) \\ \tilde{V}(n) & E_k \end{pmatrix} \Gamma^{-1}(n) \begin{pmatrix} \tilde{\alpha}(t) \\ \tilde{\beta}(t) \end{pmatrix} \quad (2.40)$$

が得られる. ここで 下式に示す対角化が行われたとする.

$$\Gamma(n) \begin{pmatrix} E_a & \tilde{V}(n) \\ \tilde{V}(n) & E_k \end{pmatrix} \Gamma^{-1}(n) = \begin{pmatrix} \lambda^{(1)}(n) & 0 \\ 0 & \lambda^{(2)}(n) \end{pmatrix} \quad (2.41)$$

$$\begin{aligned} \lambda^{(1)}(n) &= \frac{1}{2}(E_a + E_k + \sqrt{(E_a - E_k)^2 + 4\tilde{V}^2(n)}) \\ \text{但し} \\ \lambda^{(2)}(n) &= \frac{1}{2}(E_a + E_k - \sqrt{(E_a - E_k)^2 + 4\tilde{V}^2(n)}) \end{aligned} \quad (2.41)'$$

(2.40) 及び (2.41) 式より

$$\frac{d}{dt} \tilde{\alpha}(t) = \frac{1}{i\hbar} \lambda^{(1)}(n) \tilde{\alpha}(t), \quad \frac{d}{dt} \tilde{\beta}(t) = \frac{1}{i\hbar} \lambda^{(2)}(n) \tilde{\beta}(t) \quad (2.42)$$

(2.37) 式の下で (2.42) 式を解くと, $t_n \leq t < t_{n+1}$ の範囲内で

$$\tilde{\alpha}(t) = \tilde{\alpha}(t_n) \exp\left[\frac{1}{i\hbar} \lambda^{(1)}(n)(t - t_n)\right], \quad \tilde{\beta}(t) = \tilde{\beta}(t_n) \exp\left[\frac{1}{i\hbar} \lambda^{(2)}(n)(t - t_n)\right]$$

$\Delta t = t_{n+1} - t_n$ とし, 分割数 N が極めて大きいので $\tilde{V}(n+1)$ と $\tilde{V}(n)$ の差は極めて小さい. よって連続的に接続でき

$$\tilde{\alpha}(t_{n+1}) = \tilde{\alpha}(t_n) \exp\left[\frac{1}{i\hbar} \lambda^{(1)}(n)\Delta t\right], \quad \tilde{\beta}(t_{n+1}) = \tilde{\beta}(t_n) \exp\left[\frac{1}{i\hbar} \lambda^{(2)}(n)\Delta t\right] \quad (2.43)$$

よって (2.43) 式より

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}(t_N) &= \tilde{\alpha}(t_c) = \tilde{\alpha}(t_0) \exp\left[\frac{1}{i\hbar} \Delta t \sum_{m=0}^{N-1} \lambda^{(1)}(m)\right] = \tilde{\alpha}(t_0) \exp\left[\frac{1}{i\hbar} s_{N-1}^{(1)} \Delta t\right] \\ \tilde{\beta}(t_N) &= \tilde{\beta}(t_c) = \tilde{\beta}(t_0) \exp\left[\frac{1}{i\hbar} \Delta t \sum_{m=0}^{N-1} \lambda^{(2)}(m)\right] = \tilde{\beta}(t_0) \exp\left[\frac{1}{i\hbar} s_{N-1}^{(2)} \Delta t\right] \end{aligned}$$

$$\text{ここで } s_{N-1}^{(1)} \equiv \sum_{m=0}^{N-1} \lambda^{(1)}(m), \quad s_{N-1}^{(2)} \equiv \sum_{m=0}^{N-1} \lambda^{(2)}(m) \quad (2.44)$$

ところで (2.39) 式より

$$\begin{pmatrix} \alpha(t_N) \\ \beta(t_N) \end{pmatrix} = \Gamma^{-1}(N) \begin{pmatrix} \tilde{\alpha}(t_N) \\ \tilde{\beta}(t_N) \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

また N が極めて大きいので, 行列 Γ は

$$\begin{pmatrix} \Gamma_{11}(N) & \Gamma_{12}(N) \\ \Gamma_{21}(N) & \Gamma_{22}(N) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{V_0}{\sqrt{V_0^2 + (\lambda^{(1)}(N) - E_a)^2}} & \frac{\lambda^{(1)}(N) - E_a}{\sqrt{V_0^2 + (\lambda^{(1)}(N) - E_a)^2}} \\ \frac{V_0}{\sqrt{V_0^2 + (\lambda^{(2)}(N) - E_a)^2}} & \frac{\lambda^{(2)}(N) - E_a}{\sqrt{V_0^2 + (\lambda^{(2)}(N) - E_a)^2}} \end{pmatrix} \quad (2.46)$$

(2.44)-(2.46) 式より

$$\begin{aligned} \alpha(t_N) &= \Gamma_{12}(N) \tilde{\beta}(0) \exp\left[\frac{1}{i\hbar} s_{N-1}^{(2)} \Delta t\right] - \Gamma_{22}(N) \tilde{\alpha}(0) \exp\left[\frac{1}{i\hbar} s_{N-1}^{(1)} \Delta t\right] \\ \beta(t_N) &= -\Gamma_{11}(N) \tilde{\beta}(0) \exp\left[\frac{1}{i\hbar} s_{N-1}^{(2)} \Delta t\right] + \Gamma_{21}(N) \tilde{\alpha}(0) \exp\left[\frac{1}{i\hbar} s_{N-1}^{(1)} \Delta t\right] \end{aligned} \quad (2.47)$$

ここで, $t_0 \rightarrow 0$ とした. 次に $\tilde{\alpha}(0)$ 及び $\tilde{\beta}(0)$ については以下の値が求められている.

$$x > 0 \quad \tilde{\alpha}(0) = 1 \quad \tilde{\beta}(0) = 0, \quad x < 0 \quad \tilde{\alpha}(0) = 0 \quad \tilde{\beta}(0) = -1 \quad (2.48)$$

再び (2.36) 式に戻り

$$\begin{aligned} s &\equiv 2x(\alpha_c \beta_c^* + \alpha_c^* \beta_c) + 1 - 2|\alpha_c|^2 \\ &= 2x(\alpha(t_N) \beta^*(t_N) + \alpha^*(t_N) \beta(t_N)) + 1 - 2|\alpha(t_N)|^2 \end{aligned} \quad (2.49)$$

として s を定義すると x の正負に拘わらず (2.46)-(2.48) 式及び (2.41)' 式より

$$s = \sqrt{1 + 4x^2} \quad (2.50)$$

となる. なお前述したように $x = V_0/(E_k - E_a)$ である. これより (2.36) 式は (2.27) 式に等しいことが判る. なお N は極めて大きいという仮定なので (2.37) 式の設定は (2.28) 式に示すように $0 \leq t \leq t_c$ で $V(t) = V_0 t/t_c$ としたことと等しいと考えてよい. よって (2.28) 式に示す数学的操作を行ない, $t \geq t_c$ で $n_{aa}(t)$ の時間平均をとれば, 基底状態の期待値と一致することが証明された.

3 計算結果

理論の箇所でも説明したように (2.28) 式に示す数学的操作を行えば, 基底状態の期待値が得られることが判明した. ただ

しハミルトニアンは単純すぎるが、今後複雑な系でも (2.28) 式に示す操作を行うことで基底状態での期待値が得られると仮定する。またその仮定が正しいか否かを判断するため Green 関数による値との比較を試みる。

今回は次式でしめす電子間相互作用を有する極めて簡単な Anderson ハミルトニアンについて解析を行ってみよう。

$$\begin{aligned} \hat{H}(t) = & E_k \sum_{\sigma} \hat{C}_{k\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} + E_a \sum_{\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} + V_{ka}(t) \sum_{\sigma} \hat{C}_{k\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} \\ & + V_{ak}(t) \sum_{\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} + U(t) \hat{C}_{a\uparrow}^+ \hat{C}_{a\uparrow} \hat{C}_{a\downarrow}^+ \hat{C}_{a\downarrow} \end{aligned} \quad (3.1)$$

上式で E_k 及び E_a は、波数 k の電子のエネルギー及び状態 a の電子のエネルギー、 $V_{ak}(t)$ 及び $V_{ka}(t)$ はそれぞれ時刻 t での状態 k から状態 a 及び状態 a から状態 k への転送行列である。 $U(t)$ は、状態 $a\uparrow$ スピンと状態 $a\downarrow$ スピンとの間の時刻 t におけるクーロン相互作用である。 $\hat{C}_{k\sigma}^+$ 、 $\hat{C}_{k\sigma}$ は波数 k スピン σ の電子の生成及び消滅演算子である。 $\hat{C}_{a\sigma}^+$ 、 $\hat{C}_{a\sigma}$ は状態 a スピン σ の電子の生成及び消滅演算子である。(3.1) 式を見て判るように $\hat{C}_{a\uparrow}^+ \hat{C}_{a\uparrow} \hat{C}_{a\downarrow}^+ \hat{C}_{a\downarrow}$ は多体項である。これらを鑑み前節でも言及した $\langle \hat{C}_{a\uparrow}^+ \hat{C}_{a\uparrow} \rangle$ について求めてみよう。なお (3.1) 式で示してあるようにスピン σ を含むため、今回は $\langle \hat{C}_{a\uparrow}^+ \hat{C}_{a\uparrow} \rangle$ について求める。これは定常状態での状態 a スピン \uparrow の電子数である。

(2.7) 式を (3.1) 式で表されるハミルトニアンに対して適用させると、以下に示す連立方程式を得る^{48,50}。

$$\frac{d}{dt} n_{a\sigma a\sigma}(t) = \frac{1}{i\hbar} \{V_{ak}(t) n_{a\sigma k\sigma}(t) - V_{ka}(t) n_{k\sigma a\sigma}(t)\} \quad (3.2)$$

$$\frac{d}{dt} n_{k\sigma k\sigma}(t) = \frac{1}{i\hbar} \{V_{ka}(t) n_{k\sigma a\sigma}(t) - V_{ak}(t) n_{a\sigma k\sigma}(t)\} \quad (3.3)$$

$$\frac{d}{dt} n_{a\sigma k\sigma}(t) = \frac{1}{i\hbar} \{(E_k - E_a) n_{a\sigma k\sigma}(t) + V_{ka}(t) (n_{a\sigma a\sigma}(t) - n_{k\sigma k\sigma}(t)) - U(t) \gamma(t)\} \quad (3.4)$$

ここで $n_{i\sigma j\sigma}(t) \equiv \langle \psi(t) | \hat{C}_{i\sigma}^+ \hat{C}_{j\sigma} | \psi(t) \rangle$ 及び $\gamma(t) \equiv \langle \psi(t) | \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} | \psi(t) \rangle$ 次に $\gamma(t)$ の微分は

$$\frac{d}{dt} \gamma(t) = \frac{1}{i\hbar} \{(E_k - E_a - U(t)) \gamma(t) + V_{ak}(t) f_1(t) + V_{ka}(t) (f_2(t) - f_3(t) - f_4(t))\} \quad (3.5)$$

ここで

$$f_1(t) = \langle \psi(t) | \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} | \psi(t) \rangle \quad (3.5)'$$

$$f_2(t) = \langle \psi(t) | \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} | \psi(t) \rangle \quad (3.5)''$$

$$f_3(t) = \langle \psi(t) | \hat{C}_{k\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} | \psi(t) \rangle \quad (3.5)'''$$

$$f_4(t) = \langle \psi(t) | \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} \hat{C}_{k\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} | \psi(t) \rangle \quad (3.5)''''$$

$f_1(t) \sim f_4(t)$ の微分は

$$\frac{d}{dt} f_1(t) = \frac{1}{i\hbar} \{(2E_k - 2E_a - U(t)) f_1(t) + V_{ka}(t) (f_5(t) + \gamma(t) - f_6(t) - f_7(t))\} \quad (3.6)$$

$$\frac{d}{dt} f_2(t) = \frac{1}{i\hbar} \{V_{ak}(t) (f_5(t) + \gamma(t)) - V_{ka}(t) (f_5^*(t) + \gamma^*(t))\} \quad (3.7)$$

$$\frac{d}{dt} f_3(t) = \frac{1}{i\hbar} \{V_{ak}(t) (f_6(t) - \gamma(t)) - V_{ka}(t) (f_6^*(t) - \gamma^*(t))\} \quad (3.8)$$

$$\frac{d}{dt} f_4(t) = \frac{1}{i\hbar} \{V_{ak}(t) (f_7(t) - \gamma(t)) + V_{ka}(t) (f_5^*(t) - f_6^*(t))\} \quad (3.9)$$

ここで

$$f_5(t) = \langle \psi(t) | \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} | \psi(t) \rangle \quad (3.9)'$$

$$f_6(t) = \langle \psi(t) | \hat{C}_{k\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} | \psi(t) \rangle \quad (3.9)''$$

$$f_7(t) = \langle \psi(t) | \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} \hat{C}_{k\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} | \psi(t) \rangle \quad (3.9)'''$$

$f_5(t) \sim f_7(t)$ の微分は

$$\frac{d}{dt} f_5(t) = \frac{1}{i\hbar} \{(E_k - E_a - U(t)) f_5(t) + V_{ak}(t) f_1(t) + V_{ka}(t) (f_2(t) - f_4^*(t) - f_8(t))\} \quad (3.10)$$

$$\frac{d}{dt} f_6(t) = \frac{1}{i\hbar} \{(E_k - E_a) f_6(t) - V_{ak}(t) f_1(t) + V_{ka}(t) (f_3(t) + f_4^*(t) - f_9(t)) - U(t) g_1(t)\} \quad (3.11)$$

$$\frac{d}{dt} f_7(t) = \frac{1}{i\hbar} \{(E_k - E_a) f_7(t) - V_{ak}(t) f_1(t) + V_{ka}(t) (f_4(t) + f_5(t) - f_9(t)) - U(t) g_2(t)\} \quad (3.12)$$

ここで

$$f_8(t) = \langle \psi(t) | \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} \hat{C}_{k\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} | \psi(t) \rangle \quad (3.12)'$$

$$f_9(t) = \langle \psi(t) | \hat{C}_{k\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} | \psi(t) \rangle \quad (3.12)''$$

$$g_1(t) = \langle \psi(t) | \hat{C}_{k\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} | \psi(t) \rangle \quad (3.12)'''$$

$$g_2(t) = \langle \psi(t) | \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} \hat{C}_{k\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} | \psi(t) \rangle \quad (3.12)''''$$

$f_8(t), f_9(t), g_1(t), g_2(t)$ の微分は

$$\frac{d}{dt} f_8(t) = \frac{1}{i\hbar} \{V_{ak}(t) (f_7(t) - f_5(t)) - V_{ka}(t) (f_7^*(t) - f_5^*(t))\} \quad (3.13)$$

$$\frac{d}{dt} f_9(t) = \frac{1}{i\hbar} \{V_{ka}(t) (f_6^*(t) + f_7^*(t)) - V_{ak}(t) (f_6(t) + f_7(t))\} \quad (3.14)$$

$$\frac{d}{dt} g_1(t) = \frac{1}{i\hbar} \{(E_k - E_a - U(t)) g_1(t) + V_{ka}(t) (g_4(t) - g_3(t))\} \quad (3.15)$$

$$\frac{d}{dt} g_2(t) = \frac{1}{i\hbar} \{(E_k - E_a - U(t)) g_2(t) + V_{ka}(t) (g_6(t) - g_5(t))\} \quad (3.16)$$

ここで

$$g_3(t) = \langle \psi(t) | \hat{C}_{k\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} \hat{C}_{k\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} | \psi(t) \rangle \quad (3.16)'$$

$$g_4(t) = \langle \psi(t) | \hat{C}_{k\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} | \psi(t) \rangle \quad (3.16)''$$

$$g_5(t) = \langle \psi(t) | \hat{C}_{k\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} \hat{C}_{k\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} | \psi(t) \rangle \quad (3.16)'''$$

$$g_6(t) = \langle \psi(t) | \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} \hat{C}_{k\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} | \psi(t) \rangle \quad (3.16)''''$$

$g_3(t) \sim g_6(t)$ の微分は

$$\frac{d}{dt} g_3(t) = \frac{1}{i\hbar} \{V_{ka}(t) g_1^*(t) - V_{ak}(t) g_1(t)\} \quad (3.17)$$

$$\frac{d}{dt} g_4(t) = \frac{1}{i\hbar} \{V_{ak}(t) g_1(t) - V_{ka}(t) g_1^*(t)\} \quad (3.18)$$

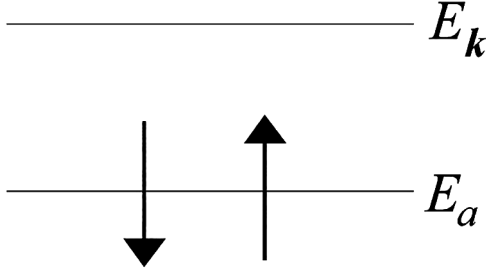


Fig. 1 Illustration of configuration, in which both spin-up (\uparrow) and spin-down (\downarrow) electrons occupy state a .

$$\frac{d}{dt}g_2(t) = \frac{1}{i\hbar}\{V_{ka}(t)g_2^*(t) - V_{ak}(t)g_2(t)\} \quad (3.19)$$

$$\frac{d}{dt}g_6(t) = \frac{1}{i\hbar}\{V_{ak}(t)g_2(t) - V_{ka}(t)g_2^*(t)\} \quad (3.20)$$

これより系のハミルトニアンが⁸, (3.1)式に見る様に多体項を有していても系を記述する微分方程式は(3.2)~(3.20)式で表現される計19個の連立微分方程式で記述できる. これらの式を基に Fig. 1 に示す始状態を想定する. これより

$$|\psi(0)\rangle \equiv \hat{C}_{a\downarrow}^+ \hat{C}_{a\uparrow}^+ |\text{VAC}\rangle \quad (3.21)$$

である. (3.21)式を基に $n_{aa\sigma}(0)$, $n_{aa\sigma}(0)$, $n_{ka\sigma}(0)$, $\gamma(0)$, $f_1(0) \sim f_6(0)$ 及び $g_1(0) \sim g_6(0)$ が容易に求められ始状態での初期値を設定できる.

ところで前節でも述べたように, これらの始状態の下で, $t=0$ で $U(t)$ 及び $V_{ak}(t)$, $V_{ka}(t)$ を0でない一定値で計算しても基底状態での期待値は導出できないと思われる. それ故前節で述べたようにこれらの諸量を以下のように定める.

$$V_{ak}(t) = V_{ka}(t) = V(t) = \begin{cases} V_0(t > t_c) \\ V_0 t / t_c (0 \leq t \leq t_c) \end{cases} \quad (3.22)$$

$$U(t) = \begin{cases} U_0(t > t_c) \\ U_0 t / t_c (0 \leq t \leq t_c) \end{cases} \quad (3.23)$$

今回の計算では $t_c = 220$ とした (なお t_c は原子単位). 前述したように $\langle \hat{C}_{a\uparrow}^+ \hat{C}_{a\uparrow} \rangle$ について求める訳だが, 数値的解いて得られる $n_{a\uparrow a\uparrow}(t)$ については t が 1000-10000 までの時間平均を $\langle \hat{C}_{a\uparrow}^+ \hat{C}_{a\uparrow} \rangle$ とした (なお t は原子単位). 前節で述べたように (3.22)-(3.23)式のように定めれば基底状態の期待値が得られる事が期待できるが, (3.1)式で表されるハミルトニアンは, (2.8)式でのハミルトニアンに比べかなり複雑であり多体項が存在する. それ故グリーン関数を用いる摂動計算を行い, 両者の比較を通じて (3.22)-(3.23)式にみる数学的操作の正当性について吟味する. なおグリーン関数を用いる摂動計算では, このような簡単な系でも ∞ のダイアグラムが出現する. それ故今回の計算では3次摂動までの近似解を用いた.

次にグリーン関数を用いる摂動計算について考えてゆく. まずグリーン関数 $G_{a\uparrow a\uparrow}(t-t')$ を以下のように定義する.

$$G_{a\uparrow a\uparrow}(t-t') = -i \langle T[\hat{C}_{a\uparrow}^+(t) \hat{C}_{a\uparrow}^+(t')] \rangle \quad (3.24)$$

ここで

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$$

$$\hat{H}_0 = E_k \sum_{\sigma} \hat{C}_{k\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma} + E_a \sum_{\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} + V_{ka} \sum_{\sigma} \hat{C}_{k\sigma}^+ \hat{C}_{a\sigma} + V_{ak} \sum_{\sigma} \hat{C}_{a\sigma}^+ \hat{C}_{k\sigma}$$

$$\hat{H}' = U_0 \hat{C}_{a\uparrow}^+ \hat{C}_{a\uparrow} \hat{C}_{a\downarrow}^+ \hat{C}_{a\downarrow} \quad (3.24)'$$

$$\hat{C}_{a\uparrow}^+(t) \equiv \exp(i\hat{H}t/\hbar) \hat{C}_{a\uparrow}^+ \exp(-i\hat{H}t/\hbar) \quad (3.24)''$$

T は T 積であり $\langle \dots \rangle$ は, ハミルトニアン \hat{H} の基底状態での期待値である. これよりグリーン関数 $G_{a\uparrow a\uparrow}(t-t')$ は相互作用描像の下では以下のように展開出来る.

$$\begin{aligned} G_{a\uparrow a\uparrow}(t-t') &= -i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \langle T[\hat{H}'(t_1) \dots \hat{H}'(t_n) \hat{C}_{a\uparrow}^{(0)}(t) \hat{C}_{a\uparrow}^{(0)+}(t')] \rangle_0 \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} G_{a\uparrow a\uparrow}^{(n)}(t-t') \end{aligned} \quad (3.25)$$

ここで

$$\hat{C}_{a\uparrow}^{(0)}(t) \equiv \exp(i\hat{H}_0 t/\hbar) \hat{C}_{a\uparrow} \exp(-i\hat{H}_0 t/\hbar) \quad (3.25)'$$

$$\hat{H}'(t) \equiv \exp(i\hat{H}_0 t/\hbar) \hat{H}' \exp(-i\hat{H}_0 t/\hbar) \quad (3.25)''$$

$$\begin{aligned} G_{a\uparrow a\uparrow}^{(n)}(t-t') &= -i \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \langle T[\hat{H}'(t_1) \dots \hat{H}'(t_n) \hat{C}_{a\uparrow}^{(0)}(t) \hat{C}_{a\uparrow}^{(0)+}(t')] \rangle_0 \\ & \quad (3.25)''' \end{aligned}$$

である. $\langle \dots \rangle_0$ は, ハミルトニアン \hat{H}_0 の基底状態での期待値である. (3.25)式に示すように $G_{a\uparrow a\uparrow}^{(n)}(t-t')$ は n 次の摂動に対応する. 今回の計算では前述したように3次摂動までを考慮するので

$$G_{a\uparrow a\uparrow}(t-t') \approx G_{a\uparrow a\uparrow}^{(0)}(t-t') + G_{a\uparrow a\uparrow}^{(1)}(t-t') + G_{a\uparrow a\uparrow}^{(2)}(t-t') + G_{a\uparrow a\uparrow}^{(3)}(t-t') \quad (3.26)$$

これより $G_{a\uparrow a\uparrow}^{(1)}(t-t')$ は

$$G_{a\uparrow a\uparrow}^{(1)}(t-t') = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \tilde{U}(t_1-t_1) g_{a\uparrow a\uparrow}(t-t_1) g_{a\downarrow a\downarrow}(t_1-t_1) g_{a\uparrow a\uparrow}(t_1-t') \quad (3.27)$$

ここで

$$g_{a\uparrow a\uparrow}(t-t') \equiv -i \langle T[\hat{C}_{a\uparrow}^{(0)}(t) \hat{C}_{a\uparrow}^{(0)+}(t')] \rangle_0 \quad g_{a\downarrow a\downarrow}(t-t') \equiv -i \langle T[\hat{C}_{a\downarrow}^{(0)}(t) \hat{C}_{a\downarrow}^{(0)+}(t')] \rangle_0 \quad (3.27)'$$

$$\tilde{U}(t-t') = v(t-t') \delta(t-t') \quad (v(0) = U_0) \quad (3.27)''$$

である. また

$$\begin{aligned} G_{a\uparrow a\uparrow}^{(2)}(t-t') &= -\frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1' \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2' \tilde{U}(t_1-t_1') \tilde{U}(t_2-t_2') g_{a\uparrow a\uparrow}(t-t_2) g_{a\downarrow a\downarrow}(t_2-t_2') \\ & \quad \times g_{a\uparrow a\uparrow}(t_2-t_1) g_{a\downarrow a\downarrow}(t_1-t_1') g_{a\uparrow a\uparrow}(t_1-t') \\ & \quad - \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1' \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2' \tilde{U}(t_1-t_1') \tilde{U}(t_2-t_2') g_{a\uparrow a\uparrow}(t-t_1) g_{a\downarrow a\downarrow}(t_1-t_2') \\ & \quad \times g_{a\uparrow a\uparrow}(t_2-t_2) g_{a\downarrow a\downarrow}(t_2-t_1') g_{a\uparrow a\uparrow}(t_1-t') \end{aligned} \quad (3.28)$$

及び

$$\begin{aligned}
\langle \hat{C}_{a\uparrow}^+ \hat{C}_{a\uparrow} \rangle &= n_{0\uparrow} - 2yn_{0\downarrow}(4+1/x^2)^{-3/2} + y^2 \{ 4n_{0\uparrow}(4+1/x^2)^{-3} - 3(n_{0\downarrow})^2 x^4(1+4x^2)^{-5/2} \} \\
&+ y^3 \{ -2(n_{0\downarrow})^3 \frac{1+x\sqrt{4+1/x^2}}{x(4+1/x^2)^2} (1-6n_{0\uparrow}+10(n_{0\uparrow})^2-5(n_{0\uparrow})^3) + 18 \cdot \frac{1}{x} (n_{0\uparrow})^2 \\
&\times (4+1/x^2)^{-4} - 8n_{0\downarrow}(4+1/x^2)^{-9/2} - \frac{(1/x + \sqrt{4+1/x^2})^4}{16(4+1/x^2)^{7/2}} [4Q_1(n_{0\uparrow}) + P_1(x) \\
&\times Q_2(n_{0\uparrow}) + P_2(x)Q_3(n_{0\uparrow})] \} \quad (3.34)
\end{aligned}$$

ここで,

$$\begin{aligned}
y &= U_0 / |V_{ak}| = U_0 / V_0 \\
Q_1(n_{0\uparrow}) &= 1 - 6n_{0\uparrow} + 10(n_{0\uparrow})^2 - 5(n_{0\uparrow})^3, \quad Q_2(n_{0\uparrow}^0) = \frac{3}{2}(1 - n_{0\uparrow} - 4(n_{0\uparrow})^2) \\
Q_3(n_{0\uparrow}) &= 3 - \frac{15}{2}n_{0\uparrow} - \frac{23}{4}(n_{0\uparrow})^2 + \frac{49}{4}(n_{0\uparrow})^3 \quad (3.34)'
\end{aligned}$$

$$P_1(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{1-x\sqrt{4+1/x^2}}{1+x\sqrt{4+1/x^2}} \right)^2 (1+n_{0\uparrow}), \quad P_2(x) = \frac{1-x\sqrt{4+1/x^2}}{1+x\sqrt{4+1/x^2}}$$

ところで(3.34)式は以下のように表せる.

$$\langle \hat{C}_{a\uparrow}^+ \hat{C}_{a\uparrow} \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} y^m \lambda_m(x) \quad (3.35)$$

但し

$$\lambda_0(x) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1+4x^2}} \right), \quad \lambda_1(x) = - \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1+4x^2}} \right) (1+4x^2)^{-3/2} x^3, \dots \quad (3.35)'$$

である.

Fig. 3はグリーン関数により得られた解析的な値(3.34)式

と(3.21)式での始状態を基に(3.2)-(3.20)式を数値的に解いた値を比較したものである. クーロン相互作用 U_0 を横軸にとってあるが, Fig. 3 c)が示すように V_0 が大きい場合, U_0 は広範囲で数値解と解析解の整合性は良好であるが, V_0 が小さくなるにつれて整合性は乏しくなる (Fig. 3 a), Fig. 3 b). これは(3.34)'式で定義される $y = U_0/V_0$ に起因する. (3.35)式に示すように $\langle \hat{C}_{a\uparrow}^+ \hat{C}_{a\uparrow} \rangle$ は, $y^m \lambda_m(x)$ の線形結合で表現されるから, V_0 が大きい場合 y は小さくなり, U_0 は広範囲で数値解と解析解の整合性は良好となると考えられる. なお V_0 の値によらず U_0 がある値までは, グリーン関数による摂動計算と数値解による結果は整合性がよいことより, (3.22)-(3.23)式による数学的操作を通じて, 連立微分方程式の数値解は基底状態の期待値を表しているものと思われる.

ところで(3.2)-(3.20)式から構成される一群の連立微分方程式は他にも有益な情報を含んでいる. たとえば(3.5)'式で示される $f_2(t)$ は, 状態 $a\uparrow$ 及び状態 $a\downarrow$ の相関を表現している. 同様に(3.12)'式で示される $f_0(t)$ は, 状態 $k\uparrow$ 及び状態 $k\downarrow$ の相関を表現している. 今回は状態 $a\uparrow$ 及び状態 $a\downarrow$ の相関, 即ち $\langle \hat{C}_{a\uparrow}^+ \hat{C}_{a\uparrow} \hat{C}_{a\downarrow}^+ \hat{C}_{a\downarrow} \rangle$ についての数値計算結果とグリーン関数による解析的結果との比較を行う. まず次式で定義される2体のグリーン関数 $G_{aa}(t, t', t'', t''')$ を導入する.

$$\begin{aligned}
G_{aa}(t, t', t'', t''') &= -i \langle T[\hat{C}_{a\uparrow}(t) \hat{C}_{a\downarrow}(t') \hat{C}_{a\uparrow}^+(t'') \hat{C}_{a\downarrow}^+(t''')] \rangle \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} G_{aa}^{(n)}(t, t', t'', t''') \quad (3.36)
\end{aligned}$$

ここで

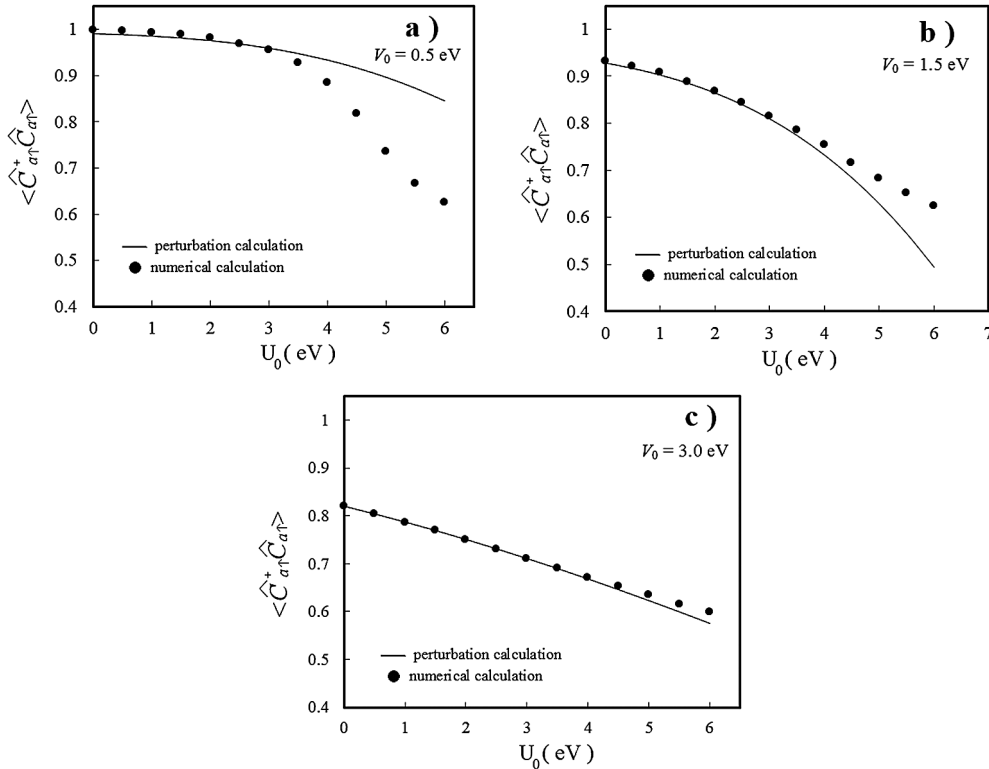


Fig. 3 Comparison of $\langle \hat{C}_{a\uparrow}^+ \hat{C}_{a\uparrow} \rangle$ derived from eqs. (3.2)–(3.20) (numerical calculations, black circles) and $\langle \hat{C}_{a\uparrow}^+ \hat{C}_{a\uparrow} \rangle$ calculated from eq. (3.34) (perturbation calculations, solid lines) with respect to the Coulomb repulsive interaction U_0 . $E_k = 2 \text{ eV}$, $E_a = -3 \text{ eV}$, a) $V_0 = 0.5 \text{ eV}$, b) $V_0 = 1.5 \text{ eV}$, and c) $V_0 = 3.0 \text{ eV}$.

$$G_{aa}^{(n)}(t, t', t'', t''') \equiv -i \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \times \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \left\langle T[\hat{H}'(t_1) \cdots \hat{H}'(t_n) \hat{C}_{a\uparrow}^{(0)}(t) \hat{C}_{a\downarrow}^{(0)}(t') \hat{C}_{a\uparrow}^{(0)+}(t'') \hat{C}_{a\downarrow}^{(0)+}(t''')] \right\rangle_0 \quad (3.36)$$

である。2次摂動までの計算を行うので

$$G_{aa}(t, t', t'', t''') \approx G^{(0)}_{aa}(t, t', t'', t''') + G^{(1)}_{aa}(t, t', t'', t''') + G^{(2)}_{aa}(t, t', t'', t''') \quad (3.37)$$

これより1次摂動での2体のグリーン関数は、

$$G^{(1)}_{aa}(t, t', t'', t''') = -\frac{1}{\hbar} g_{a\downarrow a\downarrow}(t'-t''') \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \tilde{U}(t_1-t_2) g_{a\uparrow a\uparrow}(t-t_1) g_{a\downarrow a\downarrow}(t_1-t_2) g_{a\uparrow a\uparrow}(t_2-t''') - \frac{1}{\hbar} g_{a\uparrow a\uparrow}(t-t''') \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \tilde{U}(t_1-t_2) g_{a\downarrow a\downarrow}(t'-t_1) g_{a\uparrow a\uparrow}(t_1-t_2) g_{a\downarrow a\downarrow}(t_2-t''') \quad (3.38)$$

2次摂動での2体のグリーン関数は、

$$G^{(2)}_{aa}(t, t', t'', t''') = \frac{i}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1' \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2' \tilde{U}(t_1-t_1') \tilde{U}(t_2-t_2') g_{a\uparrow a\uparrow}(t-t_1) g_{a\downarrow a\downarrow}(t_1-t_2') \times g_{a\uparrow a\uparrow}(t_2'-t''') g_{a\downarrow a\downarrow}(t'-t_1) g_{a\uparrow a\uparrow}(t_1-t_2) g_{a\downarrow a\downarrow}(t_2-t''') + \frac{i}{\hbar^2} g_{a\downarrow a\downarrow}(t'-t''') \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1' \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2' \tilde{U}(t_1-t_1') \tilde{U}(t_2-t_2') g_{a\uparrow a\uparrow}(t-t_1) g_{a\downarrow a\downarrow}(t_1-t_2') \times g_{a\uparrow a\uparrow}(t_2'-t''') g_{a\downarrow a\downarrow}(t_2-t_1) g_{a\uparrow a\uparrow}(t_1-t_2) g_{a\downarrow a\downarrow}(t_2-t''') + \frac{i}{\hbar^2} g_{a\uparrow a\uparrow}(t-t''') \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1' \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2' \tilde{U}(t_1-t_1') \tilde{U}(t_2-t_2') g_{a\downarrow a\downarrow}(t'-t_1) g_{a\uparrow a\uparrow}(t_1-t_2) \times g_{a\downarrow a\downarrow}(t_2-t_1) g_{a\uparrow a\uparrow}(t_2-t''') g_{a\downarrow a\downarrow}(t_1-t_2) g_{a\uparrow a\uparrow}(t_1-t''') \quad (3.39)$$

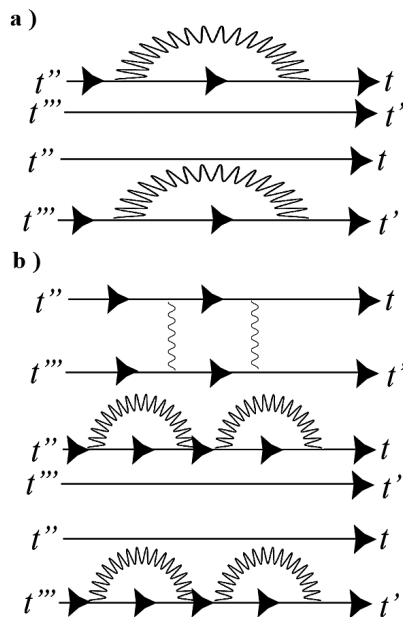


Fig. 4 Feynman diagrams for a) first- and b) second-order two-body Green's functions as shown in eqs. (3.38) and (3.39). The straight lines represent the electrons in state $a\uparrow$ ($g_{a\uparrow a\uparrow}(t-t')$ or $g_{a\downarrow a\downarrow}(t-t')$) and the semicircular wavy lines and wavy lines represent $\tilde{U}(t-t')$.

$$+ \frac{i}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1' \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2' \tilde{U}(t_1-t_1') \tilde{U}(t_2-t_2') g_{a\uparrow a\uparrow}(t-t_2) g_{a\downarrow a\downarrow}(t_2-t_2') g_{a\uparrow a\uparrow}(t_2'-t''') \times g_{a\downarrow a\downarrow}(t'-t_1) g_{a\uparrow a\uparrow}(t_1-t_1) g_{a\downarrow a\downarrow}(t_1-t''') + \frac{i}{\hbar^2} g_{a\downarrow a\downarrow}(t'-t''') \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1' \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2' \tilde{U}(t_1-t_1') \tilde{U}(t_2-t_2') g_{a\uparrow a\uparrow}(t-t_2) g_{a\downarrow a\downarrow}(t_2-t_2') \times g_{a\uparrow a\uparrow}(t_2'-t''') g_{a\downarrow a\downarrow}(t_2-t_1) g_{a\uparrow a\uparrow}(t_1-t_2) g_{a\downarrow a\downarrow}(t_2-t''') + \frac{i}{\hbar^2} g_{a\uparrow a\uparrow}(t-t''') \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1' \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2' \tilde{U}(t_1-t_1') \tilde{U}(t_2-t_2') g_{a\downarrow a\downarrow}(t'-t_2) g_{a\uparrow a\uparrow}(t_2-t_2') g_{a\downarrow a\downarrow}(t_2'-t''') \times g_{a\downarrow a\downarrow}(t_2-t_1) g_{a\uparrow a\uparrow}(t_1-t_2) g_{a\downarrow a\downarrow}(t_2-t''') \quad (3.39)$$

(3.38)-(3.39)式に示すファイマンダイアグラムをFig. 4に表している。これより、前と同じくフーリエ変換を施し $\langle \hat{C}_{a\uparrow}^+ \hat{C}_{a\uparrow} \hat{C}_{a\downarrow}^+ \hat{C}_{a\downarrow} \rangle$ を求めると

$$\langle \hat{C}_{a\uparrow}^+ \hat{C}_{a\uparrow} \hat{C}_{a\downarrow}^+ \hat{C}_{a\downarrow} \rangle = n_{0\uparrow} n_{0\downarrow} - y \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1+4x^2}} \right)^2 (4+1/x^2)^{-3/2} + \frac{3}{16} y^2 \left(\frac{1}{x} + 3\sqrt{4+1/x^2} \right)^2 (4+1/x^2)^{-4} - \frac{3}{4} y^2 \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1+4x^2}} \right)^3 x^4 (1+4x^2)^{-5/2} + 3y^2 \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1+4x^2}} \right)^2 (4+1/x^2)^{-3} \quad (3.40)$$

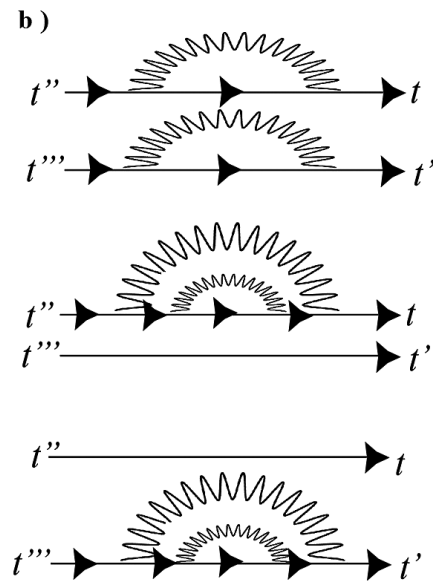
これより

$$\langle \hat{C}_{a\uparrow}^+ \hat{C}_{a\uparrow} \hat{C}_{a\downarrow}^+ \hat{C}_{a\downarrow} \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} y^m \kappa_m(x) \quad (3.41)$$

ここで

$$\kappa_0(x) = n_{0\uparrow} n_{0\downarrow} = \frac{1}{4} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1+4x^2}} \right)^2, \quad \kappa_1(x) = - \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1+4x^2}} \right)^2 (4+1/x^2)^{-3/2} \quad (3.41)'$$

Fig. 5はグリーン関数により得られた解析的な式(3.40)式と連立微分方程式を数値的に解いた $f_2(t)$ 値の時間平均を比較した



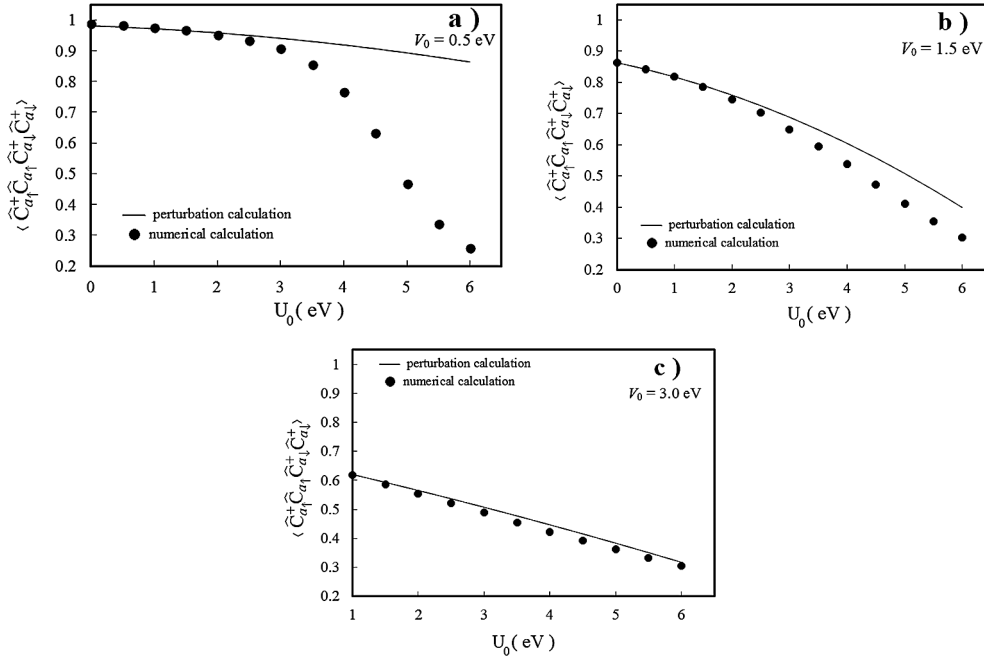


Fig. 5 Comparison of $\langle \hat{C}_{a_1}^+ \hat{C}_{a_1} \hat{C}_{a_1}^+ \hat{C}_{a_1} \rangle$ derived from eqs. (3.2)–(3.20) (numerical calculations, black circles) and $\langle \hat{C}_{a_1}^+ \hat{C}_{a_1} \hat{C}_{a_1}^+ \hat{C}_{a_1} \rangle$ calculated from eq. (3.40) (perturbation calculations, solid lines) with respect to the Coulomb repulsive interaction U_0 . $E_k = 2$ eV, $E_a = -3$ eV, a) $V_0 = 0.5$ eV, b) $V_0 = 1.5$ eV, and c) $V_0 = 3.0$ eV.

ものである。Fig. 3と同じ傾向を示し、やはり V_0 が小さくなるにつれて整合性は乏しくなる (Fig. 5 a), Fig. 5 b)。 (3.40) 式に示す様に V_0 が小さい場合 y が大きくなりその為に整合性が悪くなると思われる。確かに整合性は V_0 が小さくなるにつれて乏しくなるが、解析解 (3.40) 式と数値解との間に著しい乖離は認められない。むしろ U_0 が小さい場合整合性は良いと言える。これより (3.22)–(3.23) 式による数学的操作を通じて、連立微分方程式の数値解は2粒子相関についても基底状態の期待値を表しているものと思われる。

4 結 言

これまで我々は、量子力学において一番始原的な Schrödinger の波動方程式から導出される一連の連立微分方程式を用いて、多くの解析を行ってきた^{48–55}。この方法では前述したように波動関数の時間発展を解析するので、非定常状態の解析が可能である。また多体項が存在する問題でも系がフェルミ粒子で構成される場合、パウリの排他律により系を記述する連立微分方程式の数は有限となる。

多体項が存在する定常状態の場合、グリーン関数を用いた解析では系を正確に記述する為のグリーン関数の数は ∞ であり発散する。即ち開いた系である。しかし我々の提唱する方法によれば、前述したように正確に系を記述する微分方程式の数は有限であり閉じた系を構成する。そこから数的に厳密解が求まる可能性はあるが、それに際しては注意が必要である。系の時間発展の微分方程式は正しいのであるが、始状態 (初期値) の選択は極めて重要である。非定常状態の解析ではそのまま始状態に想定する値を代入しその後の時間発展を解析すれば良いが、定常状態での解析では始状態に想定す

る値を直接代入すると基底状態の期待値とは違う場合がある。2. 理論の箇所でも述べたようにこれには系を記述するハミルトニアン固有状態が関与している。そこで (2.28) 式

$$V(t) = V_0 t / t_c \quad 0 \leq t \leq t_c \quad V(t) = V_0 \quad t \geq t_c \quad (2.28)$$

として転送行列の時間変化を導入し、 $t \geq t_c$ で時間平均をとればその値が基底状態の期待値と一致することを解析的に示した。

3. 計算結果の箇所では、2. 理論の節で得られた結論を基に多体項が存在する極めて簡単な場合の定常状態について議論を展開している。2. 理論の節では多体項が存在しない為、理論解との比較・参照が容易にできたが、(3.1) 式で表されるハミルトニアンは極めて簡単とは言え多体項を含んでいるため理論解との比較が困難である。そこでグリーン関数を導入し、正確に系を記述する微分方程式 (19ヶ (3.2)–(3.20) 式) から得られる数値解との比較をおこなった。その際 (2.28) 式に対して (3.22)–(3.23) 式による操作を通じて、 $t \geq t_c$ で時間平均をした値が基底状態の期待値と一致するか確認を行った。

$$V_{ak}(t) = V_{ka}(t) = V(t) = \begin{cases} V_0(t > t_c) \\ V_0 t / t_c (0 \leq t \leq t_c) \end{cases} \quad (3.22)$$

$$U(t) = \begin{cases} U_0(t > t_c) \\ U_0 t / t_c (0 \leq t \leq t_c) \end{cases} \quad (3.23)$$

$\langle \hat{C}_{a_1}^+ \hat{C}_{a_1} \rangle$ 及び $\langle \hat{C}_{a_1}^+ \hat{C}_{a_1} \hat{C}_{a_1}^+ \hat{C}_{a_1} \rangle$ の数値解とグリーン関数から導出される値の対応は良好であり、これより (3.22)–(3.23) 式による操作により、数値解は基底状態の期待値を表現していると思われる。

これまでにも述べてきたが、粒子数が多くなるにつれて系を記述する微分方程式の数は急激に増加するが、方程式を数

を減らすには数多くの演算子の積からなる項（例えば今回の計算では $g_i(t) \sim g_0(t)$ など）は基本的に数値が小さいと思われるので、それに対する平均場近似を行えばよいと思われるが、それについても今後さらに詳しい議論を行う必要がある。

最後に今回一連の計算は量子力学で従来行われている積分形による量子力学的期待値導出とは、まったく反対の演算である微分形で量子力学的期待値を導出するものである。微分形では積分形に特有の特異点による積分可能性や発散の問題などを回避できる可能性があるし、微分形のほうが計算が比較的容易である。このような積分形の難点を回避する微分形による期待値導出の手法は今後さらなる可能性があるものと考えられる。

文 献

- 1) W. Heisenberg: Z. f. Phys, **49** (1928) 619.
- 2) L. Néel: Ann. de Physique, **5** (1936) 232-279.
- 3) L. Hulthén: Arkiv. Mat. Astron. Fysik, **26A** (1938) No. 11.
- 4) C. J. Gorter, J. Haantjes: Physica, **18** (1952) 285-294.
- 5) T. Nagamiya: Prog. Theor. Phys., **11** (1954) 309-327.
- 6) A. Yoshimori: J. Phys. Soc. Jpn, **14** (1959) 807-821.
- 7) T. A. Kaplan: Phys. Rev., **119** (1960) 1460-1469.
- 8) D. H. Lyons, T. A. Kaplan: Phys. Rev., **120** (1960) 1580-1584.
- 9) P. W. Anderson: Phys. Rev., **124** (1961) 41-53.
- 10) E. Lieb, T. Schultz, D. Mattis: Ann. Phys., **16** (1961) 407-466.
- 11) S. Katsura: Phys. Rev., **127** (1962) 1508-1518.
- 12) J. Kondo: Prog. Theor. Phys., **32** (1964) 37-49.
- 13) C. N. Yang: Phys. Rev. Lett., **19** (1967) 1312-1314.
- 14) E. H. Lieb, F. Y. Wu: Phys. Rev. Lett., **20** (1968) 1445-1448.
- 15) P. W. Anderson, G. Yuval, D. R. Hamann: Phys. Rev., **B1** (1970) 4464-4473.
- 16) P. W. Anderson, G. Yuval: J. Phys., **C4** (1971) 607.
- 17) J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless: J. Phys., **C6** (1973) 1181-1203.
- 18) T. Moriya, A. Kawabata: J. Phys. Soc. Jpn., **35** (1973) 669-676.
- 19) J. M. Kosterlitz: J. Phys., **C7** (1974) 1046-1060.
- 20) K. Yamada: Prog. Theor. Phys., **53** (1975) 970-986.
- 21) K. Yoshida, K. Yamada: Prog. Theor. Phys., **53** (1975) 1286-1301.
- 22) J. Hubbard: Phys. Rev., **B20** (1979) 4584-4595.
- 23) T. Moriya: *Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism*, (1985, Berlin: Springer-Verlag).
- 24) M. Imada, A. Fujimori, Y. Tokura: Rev. Mod. Phys., **70** (1998) 1039-1264.
- 25) K. Takahashi, K. Yoshimura: *Itinerant Magnetism and Spin Fluctuations*, (2012, Tokyo: Uchida Rokakuho) (Japanese)
- 26) J. G. Bednorz, K. A. Müller: Z. Phys B, **64** (1986) 189-193.
- 27) M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. Q. Wang, C. W. Chu: Phys. Rev. Lett, **58** (1987) 908-910.
- 28) T. Moriya, K. Ueda: J. Phys. Soc. Jpn., **63** (1994) 1871-1880.
- 29) Y. Takada: J. Phys. Soc. Jpn., **65** (1996) 3134-3137.
- 30) P. W. Anderson: *The Theory of High Temperature Superconductivity* (1997, Princeton: Princeton Univ. Press).
- 31) S. Nakamura: J. Phys. Soc. Jpn., **69** (2000) 178-189.
- 32) J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, J. Akimitsu: Nature, **410** (2001) 63-64.
- 33) T. Takimoto, T. Moriya: Phys. Rev., **B66** (2002) 134516.
- 34) H. Kondo, T. Moriya: J. Phys. Chem. Solids, **63** (2002) 1399-1402.
- 35) Y. Yanase, T. Jujo, T. Nomura, H. Ikeda, T. Hotta, K. Yamada: Phys. Rep., **387** (2003) 1-149.
- 36) R. Akashi, R. Arita: Phys. Rev. Lett., **111** (2013) 057006.
- 37) R. Akashi, R. Arita: J. Phys. Soc. Jpn., **83** (2014) 061016.
- 38) A. P. Drozdov, M. I. Erements, I. A. Troyan, V. Ksenofontov, S. I. Shylin: Nature, **525** (2015) 73-76.
- 39) E. Cartlidge: Nature, **524** (2015) 277.
- 40) A. P. Drozdov, P. P. Kong, V. S. Minkov, S. P. Besedin, M. A. Kuzovnikov, S. Mozaffari, L. Balicas, F. F. Balakirev, D. E. Graf, V. B. Prakapenka, E. Greenberg, D. A. Knyazev, M. Tkacz, M. I. Erements: Nature, **569** (2019) 528-531.
- 41) P. Kapitza: Nature, **141** (1938) 74.
- 42) J. F. Allen, A. D. Meissner: Nature, **141** (1938) 75.
- 43) R. Onofrio, C. Raman, J. M. Vogels, J. R. Abo-Shaeer, A. P. Chikkatur, W. Ketterle: Phys. Rev. Lett., **85** (2000) 2228-2231.
- 44) C. Raman, R. Onofrio, J. M. Vogels, J. R. Abo-Shaeer, W. Ketterle: J. Low Temp. Phys., **122** (2001) 99-116.
- 45) A. L. Gaunt, T. F. Schmidutz, I. Gotlibovych, R. P. Smith, Z. Hadzibabic: Phys. Rev. Lett., **110** (2013) 200406.
- 46) R. Lopes, C. Eigen, N. Navon, D. Clément, R. P. Smith, Z. Hadzibabic: Phys. Rev. Lett., **119** (2017) 190404.
- 47) J. L. Ville, R. Saint-Jalm, É. Le Cerf, M. Aidelsburger, S. Nascimbène, J. Dalibard: Phys. Rev. Lett., **121** (2018) 145301.
- 48) S. Kondo: J. Phys. Soc. Jpn., **90** (2021) 054601.
- 49) S. Kondo: Physica B, **629** (2022) 413629.
- 50) S. Kondo, K. Yoshimura: J. Jpn. Soc. Powder Powder Metallurgy, **70** (2023) 281-289.
- 51) S. Kondo, K. Yamada: Prog. Theor. Phys., **122** (2009) 713-734.
- 52) S. Kondo: J. Phys. Soc. Jpn., **80** (2011) 044717.
- 53) S. Kondo: J. Mod. Phys., **3** (2012) 1537-1549.
- 54) S. Kondo: J. Phys. Soc. Jpn., **88** (2019) 064705.
- 55) S. Kondo: J. Phys. Soc. Jpn., **89** (2020) 044706.
- 56) L. I. Schiff: *Quantum Mechanics*, (1968, New York: McGraw-Hill College).