

## 付録 C 第 2 量子化法による多粒子系の記述

### C.1 多粒子系の状態の数表示

$N$  個のボース粒子の波動関数  $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$  は、任意の粒子の交換に対して不変でなくてはならない：

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) = \Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (1 \leq i, j \leq N). \quad (\text{C.1})$$

この  $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$  を、一粒子状態を表す規格化された波動関数の完全系  $\phi_1(\mathbf{r})$ ,  $\phi_2(\mathbf{r})$ , ... を用いて表すことを考える。この完全系は何でもよく、例えば 3 次元非等調和振動子の固有状態の集まりでもよい。粒子に区別はないのだから、多粒子系の状態は「 $\phi_1(\mathbf{r})$ ,  $\phi_2(\mathbf{r})$ ,  $\phi_3(\mathbf{r})$ , ... を占める粒子数が、 $n_1, n_2, n_3, \dots$  である」という指定の仕方しかできない。そこで、多粒子系の波動関数  $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$  を、

$$|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \quad \text{ただし、} \quad n_1 + n_2 + n_3 + \dots = N \quad (\text{C.2})$$

のように  $n_1, n_2, n_3, \dots$  の組 (状態ベクトル) で表すことにする。これは数表示と呼ばれ、 $|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$  が作る空間は**フォック (Fock) 空間**と呼ばれる。  $|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$  を、式 (C.1) の要請を満たすように一粒子状態の波動関数から作るには、

$$\underbrace{\phi_1(\ ) \phi_1(\ ) \cdots \phi_1(\ )}_{n_1 \text{個}} \underbrace{\phi_2(\ ) \phi_2(\ ) \cdots \phi_2(\ )}_{n_2 \text{個}} \underbrace{\phi_3(\ ) \phi_3(\ ) \cdots \phi_3(\ )}_{n_3 \text{個}} \cdots \quad (\text{C.3})$$

の  $N$  個の  $(\ )$  の中に、 $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$  をあらゆる順序で入れて得られる全  $N!$  個の和をとり、適当な規格化因子をかければよい。この  $N!$  個の和は、行列式

$$\begin{vmatrix} \phi_1(\mathbf{r}_1) & \phi_1(\mathbf{r}_1) & \cdots & \phi_1(\mathbf{r}_1) & \phi_2(\mathbf{r}_1) & \phi_2(\mathbf{r}_1) & \cdots & \phi_2(\mathbf{r}_1) & \phi_3(\mathbf{r}_1) & \phi_3(\mathbf{r}_1) & \cdots & \phi_3(\mathbf{r}_1) & \cdots \\ \phi_1(\mathbf{r}_2) & \phi_1(\mathbf{r}_2) & \cdots & \phi_1(\mathbf{r}_2) & \phi_2(\mathbf{r}_2) & \phi_2(\mathbf{r}_2) & \cdots & \phi_2(\mathbf{r}_2) & \phi_3(\mathbf{r}_2) & \phi_3(\mathbf{r}_2) & \cdots & \phi_3(\mathbf{r}_2) & \cdots \\ \phi_1(\mathbf{r}_3) & \phi_1(\mathbf{r}_3) & \cdots & \phi_1(\mathbf{r}_3) & \phi_2(\mathbf{r}_3) & \phi_2(\mathbf{r}_3) & \cdots & \phi_2(\mathbf{r}_3) & \phi_3(\mathbf{r}_3) & \phi_3(\mathbf{r}_3) & \cdots & \phi_3(\mathbf{r}_3) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \\ \phi_1(\mathbf{r}_N) & \phi_1(\mathbf{r}_N) & \cdots & \phi_1(\mathbf{r}_N) & \phi_2(\mathbf{r}_N) & \phi_2(\mathbf{r}_N) & \cdots & \phi_2(\mathbf{r}_N) & \phi_3(\mathbf{r}_N) & \phi_3(\mathbf{r}_N) & \cdots & \phi_3(\mathbf{r}_N) & \cdots \end{vmatrix} \quad (\text{C.4})$$

を展開し、そのときに現れる負号を、すべて正号に変えたもので与えられる。そのようなものを  $[n_1, n_2, n_3, \dots]$  と略記することにする。これは determinant (行列式) に対して permanent (パーマメント) と呼ばれる。最終的に、 $N$  個のボース粒子の波動関数 ( $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$ ) は、規格化条件

$$\int \cdots \int |\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \cdots d\mathbf{r}_N = 1 \quad (\text{C.5})$$

を満たすよう  $[n_1, n_2, n_3, \dots]$  に規格化因子をつけて、

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! n_3! \cdots N!}} [n_1, n_2, n_3, \dots] \quad (\text{C.6})$$

と一般的に表わすことができる。特に、 $N$  個全てのボース粒子が一粒子状態  $\phi_1(\mathbf{r})$  にある場合は、

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv |N, 0, 0, \dots\rangle = \frac{1}{N!} [N, 0, 0, \dots] = \prod_{k=1}^N \phi_1(\mathbf{r}_k) \quad (\text{C.7})$$

となる。

## C.2 ボース粒子系の生成, 消滅演算子, および場の演算子

ボース粒子系の消滅演算子  $\hat{a}_\mu$ 、生成演算子  $\hat{a}_\mu^\dagger$  を、次式によって定義する：

$$\hat{a}_\mu |n_1, n_2, \dots, n_\mu, \dots\rangle = \sqrt{n_\mu} |n_1, n_2, \dots, n_\mu - 1, \dots\rangle \quad (\text{C.8})$$

$$\hat{a}_\mu^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_\mu, \dots\rangle = \sqrt{n_\mu + 1} |n_1, n_2, \dots, n_\mu + 1, \dots\rangle . \quad (\text{C.9})$$

このとき、 $\hat{a}_\mu$  と  $\hat{a}_\mu^\dagger$  の積で作られる演算子  $\hat{a}_\mu \hat{a}_\mu^\dagger$ 、 $\hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\mu$  を考えると、

$$\begin{aligned} \hat{a}_\mu \hat{a}_\mu^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_\mu, \dots\rangle &= \sqrt{n_\mu + 1} \hat{a}_\mu |n_1, n_2, \dots, n_\mu + 1, \dots\rangle \\ &= n_\mu + 1 |n_1, n_2, \dots, n_\mu, \dots\rangle \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

$$\begin{aligned}\hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\mu |n_1, n_2, \dots, n_\mu, \dots\rangle &= \sqrt{n_\mu} \hat{a}_\mu^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_\mu - 1, \dots\rangle \\ &= n_\mu |n_1, n_2, \dots, n_\mu, \dots\rangle.\end{aligned}\tag{C.11}$$

となり、これらがエルミート演算子であることがわかる。特に、 $\hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\mu$  は状態  $\phi_\mu$  を占める粒子数を表す演算子になっている。そこで、**粒子数演算子**  $\hat{n}_\mu$  を、

$$\hat{n}_\mu \equiv \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\mu\tag{C.12}$$

と定義する。また、(C.10) \ (C.11) より、 $\hat{a}_\mu$ 、 $\hat{a}_\mu^\dagger$  は、交換関係

$$[\hat{a}_\nu, \hat{a}_\mu^\dagger] \equiv \hat{a}_\nu \hat{a}_\mu^\dagger - \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu = \delta_{\nu\mu}, \quad [\hat{a}_\nu, \hat{a}_\mu] = [\hat{a}_\nu^\dagger, \hat{a}_\mu^\dagger] = 0\tag{C.13}$$

を満足することがわかる。生成、消滅演算子のハイゼンベルグ表示は、系全体のハミルトニアンを  $\hat{H}$  として、 $\hat{a}_\mu(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{a}_\mu e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ 、 $\hat{a}_\mu^\dagger(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{a}_\mu^\dagger(t) e^{-i\hat{H}t/\hbar}$  と表される。これらの交換関係を計算すると、

$$\begin{aligned}[\hat{a}_\nu(t), \hat{a}_\mu^\dagger(t)] &\equiv e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{a}_\nu e^{-i\hat{H}t/\hbar} e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{a}_\mu^\dagger e^{-i\hat{H}t/\hbar} - e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{a}_\mu^\dagger e^{-i\hat{H}t/\hbar} e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{a}_\nu e^{-i\hat{H}t/\hbar} \\ &= e^{i\hat{H}t/\hbar} [\hat{a}_\nu(t), \hat{a}_\mu^\dagger(t)] e^{-i\hat{H}t/\hbar} \\ &= \delta_{\nu\mu}\end{aligned}\tag{C.14}$$

$$[\hat{a}_\nu(t), \hat{a}_\mu(t)] = [\hat{a}_\nu^\dagger(t), \hat{a}_\mu^\dagger(t)] = 0.$$

このように (C.13) と同様な結果が得られる。

ここで生成、消滅演算子を用いて、以下の演算子を定義する：

$$\begin{aligned}\hat{\Psi}(\mathbf{r}) &\equiv \sum_\mu \phi_\mu(\mathbf{r}) \hat{a}_\mu \\ \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) &\equiv \sum_\mu \phi_\mu^*(\mathbf{r}) \hat{a}_\mu^\dagger.\end{aligned}\tag{C.15}$$

これらは「**場の演算子**」と呼ばれる。場の演算子に関して交換関係を計算すると、

$$\begin{aligned}
[\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')] &\equiv \hat{\Psi}(\mathbf{r})\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') - \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')\hat{\Psi}(\mathbf{r}) \\
&= \sum_{\mu} \sum_{\nu} \phi_{\mu}(\mathbf{r})\phi_{\nu}^*(\mathbf{r}')(\hat{a}_{\mu}\hat{a}_{\nu}^{\dagger} - \hat{a}_{\nu}^{\dagger}\hat{a}_{\mu}) \\
&= \sum_{\mu} \sum_{\nu} \phi_{\mu}(\mathbf{r})\phi_{\nu}^*(\mathbf{r}')\delta_{\mu\nu} \\
&= \sum_{\mu} \phi_{\mu}(\mathbf{r})\phi_{\mu}^*(\mathbf{r}') \\
&= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')
\end{aligned} \tag{C.16}$$

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}(\mathbf{r}')] = [\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = 0 .$$

このように、 $\hat{a}_{\mu}$ 、 $\hat{a}_{\mu}^{\dagger}$ と類似した結果が得られる。これらの関係は、ハイゼンベルグ表示  $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{\Psi}(\mathbf{r})e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ 、 $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ でも同様に成り立つ：

$$\begin{aligned}
[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t)] &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\
[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t)] &= [\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t)] = 0 .
\end{aligned} \tag{C.17}$$

一粒子の場合、その波動関数  $\phi(\mathbf{r})$ の絶対値の自乗  $|\phi(\mathbf{r})|^2 = \phi^*(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})$ は、位置  $\mathbf{r}$ における粒子の存在確率密度を表が、この  $\phi^*(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})$ に対応するものとして、場の演算子の積、 $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ の期待値を計算してみると、

$$\begin{aligned}
&\langle n_1, n_2, n_3, \dots | \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Psi}(\mathbf{r}) | n_1, n_2, n_3, \dots \rangle \\
&= \langle n_1, n_2, n_3, \dots | \sum_{\mu} \sum_{\nu} \phi_{\mu}^*(\mathbf{r})\phi_{\nu}(\mathbf{r})\hat{a}_{\mu}^{\dagger}\hat{a}_{\nu} | n_1, n_2, n_3, \dots \rangle \\
&= \sum_{\mu} \sum_{\nu} \phi_{\mu}^*(\mathbf{r})\phi_{\nu}(\mathbf{r}) \langle n_1, n_2, n_3, \dots | \hat{a}_{\mu}^{\dagger}\hat{a}_{\nu} | n_1, n_2, n_3, \dots \rangle \\
&= \sum_{\mu} \phi_{\mu}^*(\mathbf{r})\phi_{\mu}(\mathbf{r}) \langle n_1, n_2, n_3, \dots | \hat{n}_{\mu} | n_1, n_2, n_3, \dots \rangle \\
&= \sum_{\mu} n_{\mu} |\phi_{\mu}(\mathbf{r})|^2
\end{aligned} \tag{C.18}$$

となり、これは位置  $\mathbf{r}$ におけるの粒子数密度を表す。

### C.3 場の演算子によるハミルトニアン表示

$N$ 個のボース粒子が、共通のポテンシャル  $V_{trap}(\mathbf{r})$ を受けて閉じ込められている系を考える。任意の2粒子間には、相互作用ポテンシャル  $U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ が働いているとする。この系のハミルトニアンは、一粒子ハミルトニアン之和と、二粒子ハミルトニアン之和として次

のように表される：

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad . \quad (\text{C.19})$$

$i$  番目の粒子に作用する一粒子ハミルトニアン  $\left[ -\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}_i) \right]$  は、波動関数  $\phi_\nu(\mathbf{r}_i)$  を以下のように一粒子状態の重ね合わせに変換する：

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}_i) \right] \phi_\mu(\mathbf{r}_i) = \sum_\nu \left\{ \int d\mathbf{r} \phi_\nu^*(\mathbf{r}) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) \right] \phi_\mu(\mathbf{r}) \right\} \phi_\nu(\mathbf{r}_i) \quad . \quad (\text{C.20})$$

また同様に、 $i$  番目と  $j$  番目の粒子に作用する二粒子ハミルトニアン  $U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$  は、波動関数  $\phi_\mu(\mathbf{r}_i) \phi_\nu(\mathbf{r}_j)$  を以下のように二粒子状態の重ね合わせに変換する：

$$U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \phi_\mu(\mathbf{r}_i) \phi_\nu(\mathbf{r}_j) = \sum_\gamma \sum_\delta \left\{ \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi_\gamma^*(\mathbf{r}) \phi_\delta^*(\mathbf{r}') U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi_\mu(\mathbf{r}) \phi_\nu(\mathbf{r}') \right\} \phi_\gamma(\mathbf{r}_i) \phi_\delta(\mathbf{r}_j) \quad . \quad (\text{C.21})$$

これらの関係と、パーマネント  $[n_1, n_2, n_3, \dots]$  の性質を利用して、多粒子系のハミルトニアンを生成、消滅演算子で書き表すと、

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_\mu \sum_\nu \left\{ \int d\mathbf{r} \phi_\nu^*(\mathbf{r}) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) \right] \phi_\mu(\mathbf{r}) \right\} a_\nu^\dagger a_\mu \\ & + \frac{1}{2} \sum_\gamma \sum_\delta \sum_\mu \sum_\nu \left\{ \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi_\gamma^*(\mathbf{r}) \phi_\delta^*(\mathbf{r}') U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi_\mu(\mathbf{r}) \phi_\nu(\mathbf{r}') \right\} a_\gamma^\dagger a_\delta^\dagger a_\mu a_\nu \end{aligned} \quad (\text{C.22})$$

となる．更に場の演算子を用いると、

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \quad (\text{C.23})$$

と表される．

## C.4 場の演算子の時間発展

ハイゼンベルグ表示における場の演算子  $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$  の時間発展は、次のハイゼンベルグの運動方程式より計算される：

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) &= [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}] \\ &= e^{i\hat{H}t/\hbar} \left[ \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \int d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}'}^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}') \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \right] e^{-i\hat{H}t/\hbar} \\ &\quad + e^{i\hat{H}t/\hbar} \left[ \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'') U(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}'') \right] e^{-i\hat{H}t/\hbar} . \end{aligned} \quad (\text{C.24})$$

まず、右辺第 1 項目の [ ] 内を計算すると、

$$\begin{aligned} &\int d\mathbf{r}' \left\{ \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}'}^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}') \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}') - \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}'}^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}') \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \right\} \\ &= \int d\mathbf{r}' \left\{ \left[ \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right] \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}'}^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}') \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \right. \\ &\quad \left. - \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}'}^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}') \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \right\} \\ &= \int d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}'}^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}') \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \\ &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}) . \end{aligned} \quad (\text{C.25})$$

次に、第 2 項目の [ ] 内を計算すると、

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \iint d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \left\{ \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'') U(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}'') \right. \\ &\quad \left. - \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'') U(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}'') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \right\} \\ &= \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \left\{ \left[ \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right] \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'') U(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}'') \right. \\ &\quad \left. - \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}'') \right\} \\ &= \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \left\{ \left[ \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) + \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'') \right] U(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}'') \right. \\ &\quad \left. - \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}'') \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \left[ \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'') \right] U(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}'') \\
&= \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}'') U(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \\
&\quad + \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'') \hat{\Psi}(\mathbf{r}'') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') U(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\
&= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}'' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'') \hat{\Psi}(\mathbf{r}'') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) U(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \\
&= \left[ \int d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') U(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}) .
\end{aligned} \tag{C.26}$$

以上の結果をまとめると、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) U(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) . \tag{C.27}$$

となる。

式 (C.27) の右辺の積分の内に表れる演算子  $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t)$  は、式 (C.18) で示したように粒子数密度を表す演算子である。考えているボース粒子系の密度分布が、ポテンシャル  $U(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$  の到達距離のスケールではほとんど変化しない、と仮定すると、 $U(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$  をデルタ関数のように扱ってもよい：

$$U(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \cong U_0 \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \tag{C.28}$$

ただし、

$$U_0 = \int d\mathbf{r}' U(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) . \tag{C.29}$$

このとき、式 (C.27) は以下ようになる：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) + U_0 \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \tag{C.30}$$

付録 D より、 $U_0$  は S 波散乱半径  $a$  を用いて、

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \quad (\text{C.31})$$

と表せる。この関係は、付録 E 「ボース凝縮体の波動関数」で重要になる。