

P4理論ゼミ 4.3.2

片山 一樹

平成 29 年 6 月 20 日

4.3.2 2 中心調和振動子殻模型

(a) 1 中心調和振動子殻模型

原点を中心とする調和振動子殻模型の 1 粒子ハミルトニアンは

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + \frac{1}{2}M\omega^2(x^2 + y^2 + z^2) \quad (1)$$

で、エネルギー固有値、固有関数は

$$H\phi_\alpha(\mathbf{r}) = E_\alpha\phi_\alpha(\mathbf{r}) \quad (2)$$

$$E_\alpha = E_N = \left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \quad (3)$$

である。量子数 α は x, y, z 軸上の 1 次元調和振動子の量子数の組み合わせ $\alpha = (n_x, n_y, n_z)$ で指定される。

この 1 粒子状態のエネルギーの低い方から核子を入れていく。1 つの 1 粒子状態にはスピンの上向きまたは下向きの陽子または中性子が入ることができ、結局 4 つの核子を入れることができる。(000) の状態に核子を 4 個詰めた (000)⁴ の配位が α 粒子の配位。

⁴He や ¹⁶O の配位はそれぞれ $N = 0, N = 1$ の単位を完全につめた配位で閉殻。閉殻のとき配位は唯一だが、中間の核についてはさまざまな配位が可能。たとえば (0p) 殻核の場合、

$$(000)_n^4(001)_n^{n-1}(001)_p^{n-1}(100)_n^{n-2}(100)_p^{n-2}(010)_n^{n-2}(010)_p^{n-2} \quad (4)$$

という配位をとり、 $(n_{\alpha 1}n_{\alpha 2}n_{\alpha 3})$ や $(n_{\beta 1}n_{\beta 2}n_{\beta 3})$ は様々な組み合わせをとることができる。

各々の配位に対する波動関数は 1 つの Slater 行列式で表すことができるが、閉殻核の配位はそれぞれただ 1 つの Slater 行列式で表されるのに対して中間の核の波動関数はいくつかの Slater 行列式の重ね合わせとなる。(配位混合)

i 番目の核クラスター C_i が A_i 個の核子からなっていて中心が \mathbf{R}_i にあるとする。各々の核子の波動関数を $\Phi_{C_i,k}(\mathbf{r}_k)$ ($k = 1, 2, \dots, A_i$) とするとクラスター C_i の波動関数は

$$\psi(C_i, \mathbf{R}_i) = \frac{1}{\sqrt{A_i!}} \det \left[\Phi_{C_i,1}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i), \dots, \Phi_{C_i,A_i}(\mathbf{r}_{A_i} - \mathbf{R}_i) \right] \quad (5)$$

$$\Phi_{C_i,k}(\mathbf{r}_k - \mathbf{R}_i) = \phi_{\alpha_k}(\mathbf{r}_k - \mathbf{R}_i)\eta(\tau_k, \sigma_k) \quad (6)$$

であり、 $\phi_\alpha(\mathbf{r})$ は調和振動子殻模型の 1 粒子波動関数、 $\eta(\tau, \sigma)$ は荷電スピン波動関数。

(b) 1 中心殻模型の重心座標の分離

1 中心調和振動子殻模型の波動関数は、重心部分と内部波動関数に分離されるが、そのことを (0p) 殻の場合について説明する。

原点を中心とした1つのクラスターを取り上げる。このクラスターを構成する1粒子波動関数は調和振動子の1粒子波動関数なので、次のように表される。

$$\phi_{\alpha_k}(\mathbf{r}_k) = P_{\alpha_k}(\mathbf{r}_k)\phi_0(\mathbf{r}_k) \quad (7)$$

これを(5),(6)式に代入すると以下ようになる。

$$\psi(C_i, \mathbf{R}_i = 0) = \frac{1}{\sqrt{A_i!}} \left(\prod_{k=1}^{A_i} \phi_0(\mathbf{r}_k) \right) \det \left[P_{C_i,1}(\mathbf{r}_1), \dots, P_{C_i,A_i}(\mathbf{r}_{A_i}) \right] \quad (8)$$

$$P_{C_i,k}(\mathbf{r}_k) = P_{\alpha_k}(\mathbf{r}_k)\eta(\tau_k, \sigma_k) \quad (9)$$

指数関数の部分は以下の通りになる。

$$\left(\prod_{k=1}^{A_i} \phi_0(\mathbf{r}_k) \right) = \left(\frac{2\nu_i}{\pi} \right)^{3A_i/4} \exp\left[-\nu_i \sum_{k=1}^{A_i} (\mathbf{r}_k)^2\right] \quad (10)$$

この関数を重心座標を含む部分と含まない部分に分ける。重心座標

$$\mathbf{X}_i = \frac{1}{A_i} \sum_{i=1}^{A_i} (\mathbf{r}_i) \quad (11)$$

を用いて、

$$\sum_{k=1}^{A_i} (\mathbf{r}_k)^2 = \sum_{k=1}^{A_i} r_k^2 - \frac{2}{A_i} \sum_{i,j=1}^{A_i} \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_j + \frac{1}{A_i} \sum_{i,j=1}^{A_i} r_i \cdot r_j + \frac{1}{A_i} \sum_{i,j=1}^{A_i} \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_j \quad (12)$$

$$= \sum_{k=1}^{A_i} r_k^2 - 2 \sum_{k=1}^{A_i} \mathbf{r}_k \cdot \mathbf{X}_i + A_i X_i^2 + A_i X_i^2 \quad (13)$$

$$= \sum_{k=1}^{A_i} (\mathbf{r}_k - \mathbf{X}_i)^2 + A_i X_i^2 \quad (14)$$

波動関数は

$$\psi(C_i, \mathbf{R}_i = 0) = \left(\frac{2\nu_i A_i}{\pi} \right)^{3/4} e^{-A_i \nu_i X_i^2} \phi(C_i) \quad (15)$$

となり、重心部分と内部波動関数 $\phi(C_i)$ に分かれる。ここでは重心部分、内部波動関数それぞれで規格化条件を満たすようにしている。内部波動関数は以下ようになる。

$$\phi(C_i) = N_0 \left(\frac{2\nu_i}{\pi} \right)^{3(A_i-1)/4} \exp\left[-\nu_i \sum_{k=1}^{A_i} (\mathbf{r}_k - \mathbf{X}_i)^2\right] \det \left[P_{C_i,1}(\mathbf{r}_1), \dots, P_{C_i,A_i}(\mathbf{r}_{A_i}) \right] \quad (16)$$

N_0 は規格化定数。この内部波動関数が重心座標を含んでいないなら重心座標が分離されたことになる。そのことを示すには、全ての粒子の座標を一様に平行移動させたときすなわち

$$\mathbf{r}_k \rightarrow \mathbf{r}_k + \mathbf{a} \quad (17)$$

としたとき、波動関数が不変であることを示せば良い。この平行移動のもとで $\mathbf{r}_k - \mathbf{X}_i$ は不変。残りの行列式の部分が平行移動に対して不変であることを示す。

p 殻核の場合について考える。行列式の性質上、1つの状態に1つの波動関数を割り当ててしまっても問題ないので $P_{C_i,k}(\mathbf{r}) k=1, 2, \dots, A_i$ として最初の4つの状態 $k=1, 2, 3, 4$ に $(000)^4$ の部分の1粒子状態を割り当てる。これら4つの状態では1粒子波動関数の多項式部分は1であるから、

$$P_{C_i,k}(\mathbf{r}) = P_{\alpha_k}(\mathbf{r})\eta(\tau, \sigma) = (n \uparrow), (n \downarrow), (p \uparrow), (p \downarrow) \quad (18)$$

となり、 $k=5, \dots, A_1$ については $P_{\alpha_k}(r) = 2\sqrt{r}$ であるので、

$$\begin{aligned} & \det \left[P_{C,1}(r_1 + a), \dots, P_{C,A_1}(r_{A_1} + a) \right] \\ &= \det \left[P_{C,1}(r_1), P_{C,2}(r_2), P_{C,3}(r_3), P_{C,4}(r_4), P_{C,5}(r_5) + 2\sqrt{a} \eta_5(r, \sigma), \dots, P_{C,A_1}(r_{A_1}) + 2\sqrt{a} \eta_{A_1}(r, \sigma) \right] \end{aligned}$$

となるが、ここで $\eta_k(r, \sigma)$ は $P_{C,1}(r_1), P_{C,2}(r_2), P_{C,3}(r_3), P_{C,4}(r_4)$ のいずれかに等しい。行列式の性質上、ある行の定数倍を別の行に足したものもとの行列式と同じ値になるので、

$$\det \left[P_{C,1}(r_1 + a), \dots, P_{C,A_1}(r_{A_1} + a) \right] = \det \left[P_{C,1}(r_1), \dots, P_{C,A_1}(r_{A_1}) \right] \quad (19)$$

が成り立ち、平行移動のもとで行列式部分是不変であることが示された。よって 1 中心調和振動子殻模型の波動関数は、重心座標と内部座標に関する部分に分離された。

さらに、sd 殻核の場合にも同様にして重心座標が分離される。

(c) 2 中心模型の Slater 行列式 2 中心模型の 2 つのクラスターの波動関数が、1 つの Slater 行列式で表されるとき、全体の波動関数も 1 つの行列式で表されることを示す。全体の波動関数は以下のように表される。

$$\begin{aligned} \Psi(R_1, R_2) &= N_0 \mathcal{A} \left[\psi(C_1, R_1) \psi(C_2, R_2) \right] \\ &= \frac{N_0}{\sqrt{A_1! A_2!}} \mathcal{A} \left[\det \{ \Phi_{C,1}(1 - R_1), \dots, \Phi_{C,A_1}(r_{A_1} - R_1) \} \right. \\ &\quad \left. \times \det \{ \Phi_{C_2,A_1+1}(r_{A_1+1} - R_2), \dots, \Phi_{C_2,A}(r_A - R_2) \} \right] \\ &= \frac{N_0}{\sqrt{A_1! A_2!}} \sum_P (-1)^P P \left[\det \{ \Phi_{C,1}(1 - R_1), \dots, \Phi_{C,A_1}(r_{A_1} - R_1) \} \right. \\ &\quad \left. \times \det \{ \Phi_{C_2,A_1+1}(r_{A_1+1} - R_2), \dots, \Phi_{C_2,A}(r_A - R_2) \} \right] \end{aligned}$$

2 行目から 3 行目で反対称化の演算子を、全ての置換について奇置換のものには -1 をかけて足し合わせることで表現する。余因子展開を用いると

$$\begin{aligned} & \det \{ \Phi_{C,1}(1 - R_1), \dots, \Phi_{C,A_1}(r_{A_1} - R_1) \Phi_{C_2,A_1+1}(r_{A_1+1} - R_2), \dots, \Phi_{C_2,A}(r_A - R_2) \} \\ &= \sum_P (-1)^P P \left[\det \{ \Phi_{C,1}(1 - R_1), \dots, \Phi_{C,A_1}(r_{A_1} - R_1) \} \times \det \{ \Phi_{C_2,A_1+1}(r_{A_1+1} - R_2), \dots, \Phi_{C_2,A}(r_A - R_2) \} \right] \end{aligned}$$

であるので、

$$\Psi(R_1, R_2) = \frac{N_0}{\sqrt{A_1! A_2!}} \mathcal{A} \left[\det \{ \Phi_{C,1}(1 - R_1), \dots, \Phi_{C,A_1}(r_{A_1} - R_1) \Phi_{C_2,A_1+1}(r_{A_1+1} - R_2), \dots, \Phi_{C_2,A}(r_A - R_2) \} \right]$$

と全体の波動関数が 1 つの Slater 行列式で表された。

(d) 2 中心模型の重心座標の分離 1 中心模型における重心波動関数と内部波動関数を分離した形式を用いると、2 中心模型の全波動関数は

$$\Psi(R_1, R_2) = N_0 \mathcal{A} \left[\psi(C_1, R_1) \psi(C_2, R_2) \right] \quad (20)$$

$$= N_0 \left(\frac{4A_1 A_2 v_1 v_2}{\pi^2} \right)^{3/4} \mathcal{A} \left[e^{-A_1 v_1 (X_1 - R_1)^2 - A_2 v_2 (X_2 - R_2)^2} \phi(C_1) \phi(C_2) \right] \quad (21)$$

ここで、 X_i はそれぞれのクラスターの核子の重心で、 $X_1 = \frac{1}{A_1} \sum_{k=1}^{A_1} r_k$ および、 $X_2 = \frac{1}{A_2} \sum_{k=A_1+1}^A r_k$ である。

2つのクラスターを構成する調和振動子パラメータ ν_1 と ν_2 が等しいとき、 $\nu_1 = \nu_2 = \nu$ とすると

$$X_G = \frac{1}{A} (A_1 X_1 + A_2 X_2) \quad (22)$$

$$R_G = \frac{1}{A} (A_1 R_1 + A_2 R_2) \quad (23)$$

$$X_r = X_1 - X_2 \quad (24)$$

$$R_r = R_1 - R_2 \quad (25)$$

を用いると、

$$A_1 \nu_1 (X_1 - R_1)^2 + A_2 \nu_2 (X_2 - R_2)^2 = A \nu (X_G - R_G)^2 + \gamma (X_r - R_r)^2 \quad (26)$$

となるので、全系の波動関数は以下ようになる。

$$\Psi(R_1, R_2) = N_0 \left(\frac{2A\nu}{\pi} \right)^{3/4} e^{-A\nu(X_G - R_G)^2} A \left[\left(\frac{2\gamma}{\pi} \right)^{3/4} e^{-\gamma(X_r - R_r)^2} \phi(C_1) \phi(C_2) \right] \quad (27)$$

重心部分は反対称化演算子に対して不変。

このようにして分離された波動関数では、クラスターの中心を示すパラメータ R_1, R_2 を $R_G = 0$ となるようにとると、波動関数の重心部分は常に

$$\omega_0(X_G) = \left(\frac{2A\nu}{\pi} \right)^{3/4} \exp(-A\nu X_G^2) \quad (28)$$

であるので $\langle \omega_0 | \omega_0 \rangle = 1$ となる。

(e) 多中心模型への拡張

多中心模型への拡張には Jacobi 座標を用いる。例として 3 中心模型を考える。図 4.6、式 (4.4) のようにパラメータをとると、

$$\Psi(R_1, R_2, R_3) = N_0 \left(\frac{2A\nu}{\pi} \right)^{3/4} e^{-A\nu(X_G - R_G)^2} A \left[\Gamma(X_{(1)} - R_{(1)}, \gamma_1) \Gamma(X_{(1)} - R_{(2)}, \gamma_2) \phi(C_1) \phi(C_2) \phi(C_3) \right] \quad (29)$$

文字の意味は式 (4.49) を参照。

3 中心模型の波動関数も、1 粒子軌道殻模型波動関数からなる 1 つの Slater 行列式で表される。

Jacobi 座標を用いれば、一般の n 中心波動関数で重心を分離することができる。

(f) 2 中心模型の 1 体および 2 体演算子の行列要素

⊗⊗⊗⊗⊗⊗⊗⊗⊗ 別紙 ⊗⊗⊗⊗⊗⊗⊗⊗⊗

(f) 2中心模型の1体および2体演算子の行列要素.

運動エネルギー T' は

$$T' = -\sum_{i=1}^A \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \quad \text{だが、重心座標 } G \text{ と相対座標 } R \text{ に分けて}$$

$$T' = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_G^2 - \sum_{i=1}^A \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2$$

$$\therefore M = \frac{A m_1 + \dots + m_A}{A} = \frac{M^{A-1}}{A}, \quad M' = A + m_1 + \dots + m_A = AM$$

$$\text{よって } T' = -\frac{\hbar^2}{2M'} \nabla_G^2 - \sum_{i=1}^A \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \quad \text{となり分離される。}$$

重心運動エネルギーを除いた内部運動エネルギー T は

$$T = -\sum_{i=1}^A \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{\hbar^2}{2AM} \nabla_G^2 \quad \text{となる。}$$

$$H_2 = (W + BP_B + HP_H + MP_M) U(r_1 - r_2) \quad (4.51)$$

P_B ...	2粒子の	スピン	を交換する	演算子.
P_H ...	"	スピンと位置座標	"	"
P_M ...	"	位置座標	"	"

2粒子のスピン座標. およびアイソスピン座標を交換演算子 P_σ, P_τ は.

$$P_\sigma = \frac{1}{2} \{1 + (\sigma_1 \cdot \sigma_2)\}, \quad P_\tau = \frac{1}{2} \{1 + (\tau_1 \cdot \tau_2)\} \quad (4.52)$$

と表せる. $\sigma = \tau$ を示す.

$$P_\sigma = \frac{1}{2} \{I_1 \otimes I_2 + \sigma_{1x} \otimes \sigma_{2x} + \sigma_{1y} \otimes \sigma_{2y} + \sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z}\}$$

と書き出し. スピン状態同位 $|1\rangle \otimes |1\rangle, |1\rangle \otimes |0\rangle, |0\rangle \otimes |1\rangle, |0\rangle \otimes |0\rangle$ に

作用させる. だが. $\sigma_x |1\rangle = |0\rangle, \sigma_x |0\rangle = |1\rangle, \sigma_y |1\rangle = -i|0\rangle, \sigma_y |0\rangle = i|1\rangle, \sigma_z |1\rangle = |1\rangle, \sigma_z |0\rangle = -|0\rangle$ なる.

$$P_\sigma(|1\rangle \otimes |1\rangle) = \frac{1}{2} \{I_1 |1\rangle \otimes I_2 |1\rangle + \sigma_{1x} |1\rangle \otimes \sigma_{2x} |1\rangle + \sigma_{1y} |1\rangle \otimes \sigma_{2y} |1\rangle + \sigma_{1z} |1\rangle \otimes \sigma_{2z} |1\rangle\}$$

$$= \frac{1}{2} \{ |1\rangle \otimes |1\rangle + |0\rangle \otimes |0\rangle - |0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |0\rangle \}$$

$$= |1\rangle \otimes |1\rangle$$

$$P_\sigma(|1\rangle \otimes |0\rangle) = \frac{1}{2} \{ |1\rangle \otimes |0\rangle + |0\rangle \otimes |1\rangle + |0\rangle \otimes |1\rangle - |1\rangle \otimes |0\rangle \}$$

$$= |0\rangle \otimes |1\rangle$$

$$P_\sigma(|0\rangle \otimes |1\rangle) = |1\rangle \otimes |0\rangle \quad P_\sigma(|0\rangle \otimes |0\rangle) = |0\rangle \otimes |0\rangle$$

とたいていは2粒子を交換して同じ.

アイソスピンにも同様.

お2

スピンを交換する Pauli 演算子は, $P_R = P_O$.

核子が右にオンであるから

$$P_H P_C = -1, \quad P_H P_O P_C = -1$$

σ の演算子を 2 乗したら 1 になったので

$$P_H = -P_C, \quad P_H = -P_O P_C$$

(4.53) の説明.

$$H = -\sum_{i=1}^A \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_i^2 + \frac{\hbar^2}{2AM} \nabla_G^2 + \sum_{i < j} V_{ij}$$

Jacobi 座標系を用いる.

A 個の核子の位置をそれぞれ r_k とする ($k=1, 2, \dots, A$)

核子 1 と核子 2 の相対位置を $x_1 = r_1 - r_2$ とする.

1 と 2 の重心位置を $y_1 = \frac{Mr_1 + Mr_2}{M+M}$ とする

3 と y_1 の相対位置を $x_2 = r_3 - y_1$ とする

⋮

A と y_{A-2} の相対位置を $x_{A-1} = r_A - y_{A-2}$ とする

全 A 個の核子の 重心位置を $X_G = \frac{1}{A} \sum_{i=1}^A r_i$ とする

$r_1, \dots, r_A \rightarrow x_1, \dots, x_{A-1}, X_G$ に変換 (2 変換)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r_k} \text{ は } \quad \frac{\partial}{\partial r_k} &= \frac{\partial x_1}{\partial r_k} \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial y_1}{\partial r_k} \frac{\partial}{\partial y_1} + \frac{\partial x_2}{\partial r_k} \frac{\partial}{\partial x_2} + \dots \\ &= \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x_3} - \dots \\ \frac{\partial}{\partial r_2} &= \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x_3} - \dots \\ \frac{\partial}{\partial r_3} &= \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} + 0 + \frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x_3} - \dots \end{aligned}$$

$$+) \quad \frac{\partial}{\partial r_n} = \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} + 0 + 0 \dots$$

$$\sum_{k=1}^A \frac{\partial}{\partial r_k} = \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\text{お2 } \nabla_G^2 = \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^2 = \left(\frac{\partial}{\partial r_1} + \frac{\partial}{\partial r_2} + \dots \right)^2 = \sum_{i=1}^A \nabla_i^2 + \sum_{i < j} \nabla_i \cdot \nabla_j$$

$$\text{お2 } \sum_{i < j} V_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i < j} V_{ij}$$

$$\text{お2 } H = -\sum_{i=1}^A \frac{\hbar^2}{2M} \frac{A-1}{A} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i < j} \left(V_{ij} + \frac{\hbar^2}{AM} (\nabla_i \cdot \nabla_j) \right)$$



$$\begin{aligned}
 (4.55) \quad \langle \Phi | \hat{O} | \Psi \rangle &= \frac{1}{A!} \langle \det \{ \phi_1(r_1), \dots, \phi_n(r_n) \} | \hat{O} | \det \{ \psi_1(r_1), \dots, \psi_n(r_n) \} \rangle \\
 &= \frac{1}{A!} \langle \hat{O}^\dagger \det \{ \phi_1(r_1), \dots, \phi_n(r_n) \} | \det \{ \psi_1(r_1), \dots, \psi_n(r_n) \} \rangle \\
 &= \frac{1}{A!} \langle A! \hat{O}^\dagger \phi_1(r_1) \dots \phi_n(r_n) | \det \{ \psi_1(r_1), \dots, \psi_n(r_n) \} \rangle \\
 &= \langle \phi_1(r_1) \dots \phi_n(r_n) | \hat{O} | \det \{ \psi_1(r_1), \dots, \psi_n(r_n) \} \rangle \quad \square
 \end{aligned}$$

① 重なり積分

$$\hat{O} = 1 \text{ over}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi | \Psi \rangle &= \langle \phi_1(r_1) \dots \phi_n(r_n) | \det \{ \psi_1(r_1), \dots, \psi_n(r_n) \} \rangle \\
 &= \int \phi_1^\dagger(r_1) \psi_1(r_1) dr_1 \int \phi_2^\dagger(r_2) \psi_2(r_2) dr_2 \dots \\
 &\quad - \int \phi_1^\dagger(r_1) \psi_2(r_1) dr_1 \int \phi_2^\dagger(r_2) \psi_1(r_2) dr_2 \dots \\
 &\quad + \dots \\
 &= \sum_P (-1)^P \langle \phi_1 | \psi_{P(1)} \rangle \langle \phi_2 | \psi_{P(2)} \rangle \dots \langle \phi_n | \psi_{P(n)} \rangle \\
 &= \det \{ \langle \phi_i | \psi_j \rangle \} \\
 &= |B| \quad (4.56)
 \end{aligned}$$

② 1粒子演算子の行列要素

$$\hat{O} = \sum_{i=1}^A O_i \text{ 考えた}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi | \hat{O} | \Psi \rangle &= \langle \phi_1(r_1) \dots \phi_n(r_n) | \sum_{i=1}^A O_i | \det \{ \psi_1(r_1), \dots, \psi_n(r_n) \} \rangle \\
 &= \langle O_1^\dagger \phi_1(r_1) \dots \phi_n(r_n) | \det \{ \psi_1(r_1), \dots, \psi_n(r_n) \} \rangle + \langle O_2^\dagger \phi_1(r_1) \dots | \det \rangle + \dots \\
 &= \sum_{i=1}^A \langle \phi_1(r_1) \dots O_i^\dagger \phi_i(r_i) \dots \phi_n(r_n) | \det \{ \psi_1(r_1), \dots, \psi_n(r_n) \} \rangle
 \end{aligned}$$

$$\hat{O} = 1 \text{ over} \sum_P (-1)^P \int \phi_1^\dagger(r_1) O_i \psi_{P(i)}(r_1) dr_1 \int \phi_2^\dagger(r_2) \psi_{P(2)}(r_2) dr_2 \dots$$

$$= \sum_P (-1)^P \langle \phi_1 | O_i | \psi_{P(1)} \rangle \langle \phi_2 | \psi_{P(2)} \rangle \dots \langle \phi_n | \psi_{P(n)} \rangle$$

$$= \begin{vmatrix} \langle \phi_1 | O_i | \psi_1 \rangle & \langle \phi_1 | O_i | \psi_2 \rangle & \dots \\ \langle \phi_2 | \psi_1 \rangle & \langle \phi_2 | \psi_2 \rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix}$$

因子展開

$$= \langle \phi_1 | O_i | \psi_1 \rangle \begin{vmatrix} \langle \phi_1 | \psi_2 \rangle & \langle \phi_1 | \psi_3 \rangle & \dots \\ \langle \phi_2 | \psi_1 \rangle & \langle \phi_2 | \psi_2 \rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} - \langle \phi_1 | O_i | \psi_2 \rangle \begin{vmatrix} \langle \phi_2 | \psi_1 \rangle & \langle \phi_2 | \psi_3 \rangle & \dots \\ \langle \phi_1 | \psi_1 \rangle & \langle \phi_1 | \psi_2 \rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} + \dots$$

1) j 列の余因子行列を \hat{b}_{ij} とおく ($i=1, \dots, A$) とする。

$$\langle \Phi | O | \Psi \rangle = \langle \Phi | O | \Psi \rangle \hat{b}_{11} - \langle \Phi | O | \Psi \rangle \hat{b}_{12} + \dots + \langle \Phi | O | \Psi \rangle \hat{b}_{1A}$$

$$= \sum_{i=1}^A (-1)^{i+1} \langle \Phi | O | \Psi \rangle \hat{b}_{ij}$$

2) \hat{b}_{ij} を行列要素とした余因子行列を \hat{B}_{ij} とおく。

$B^T \hat{B}$ とする

$$(B^T \hat{B})_{11} = b_{11} \hat{b}_{11} + b_{21} \hat{b}_{21} + b_{31} \hat{b}_{31} + \dots = |B|$$

$$(B^T \hat{B})_{12} = b_{11} \hat{b}_{12} + b_{21} \hat{b}_{22} + b_{31} \hat{b}_{32} + \dots$$

$$= \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{vmatrix} = 0$$

同様に

$$(B^T \hat{B})_{ii} = |B|, \quad (B^T \hat{B})_{ij} = 0 \quad (i \neq j)$$

$$B^T \hat{B} = |B| I$$

$$(B^T)^{-1} |B| = \hat{B} \quad \therefore (\hat{B}^{-1})^T |B| = B$$

$$\hat{b}_{ij} = (\hat{B}^{-1})_{ij} = |B| (B^{-1})_{ji}$$

$$\therefore \langle \Phi | O | \Psi \rangle = |B| \sum_{i=1}^A (-1)^{i+1} \langle \Phi | O | \Psi \rangle (B^{-1})_{ji}$$

2) 2粒子演算子の行列要素

$$O_{ij} = \sum_{\alpha_1, \alpha_2} |\alpha_2\rangle \langle \alpha_1 | O | \alpha_2 \rangle \langle \alpha_1 |$$

$$= \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \langle \alpha_1 | O | \alpha_2 \rangle |\alpha_2\rangle \langle \alpha_1 |$$

$$= \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3} |\alpha_2\rangle \langle \alpha_1 | \langle \alpha_1 | O | \alpha_2 \rangle |\alpha_3\rangle \langle \alpha_3 | P_{\alpha_1 \alpha_2}(\alpha_1)$$

$$= \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3} \langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle \langle \alpha_2 | O | \alpha_3 \rangle |\alpha_2\rangle \langle \alpha_1 | P_{\alpha_1 \alpha_2}(\alpha_1)$$

$$= \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3} \langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle \langle \alpha_2 | O | \alpha_3 \rangle P_{\alpha_1 \alpha_2}(\alpha_1) P_{\alpha_1 \alpha_3}(\alpha_1) \quad (9.59)$$