演算子がどのように第 2 量子化されるかを見る．
まずは 1 粒子に作用する演算子を足し合わせた

$$\hat{F} = \sum_i \hat{f}(\boldsymbol{r}_i) \tag{0.0.1}$$

が場の演算子を用いてどのように表されるのかを考える．$\hat{f}$ の例は，運動エネルギー $\dfrac{\hat{p}_i^2}{2m}$ や中心力ポテンシャル $V(\boldsymbol{r}_i)$ などである．位置 $\boldsymbol{r}_i$ 固有状態 λ にある粒子の波動関数を $\lambda(\boldsymbol{r}_i)$ と書くことにする．これを使って多体系全体の状態 $|n\rangle$ を

$$|n\rangle = |v_\alpha(\boldsymbol{r}_1)\rangle \otimes |v_\beta(\boldsymbol{r}_2)\rangle \otimes \cdots \otimes |v_\mu(\boldsymbol{r}_n)\rangle = |v_\alpha(\boldsymbol{r}_1), v_\beta(\boldsymbol{r}_2), \cdots, v_\nu(\boldsymbol{r}_n)\rangle \tag{0.0.2}$$

と書く．まず，

$$\hat{f}(\boldsymbol{r}_i)\,|v_\lambda(\boldsymbol{r}_i)\rangle = \sum_\mu |v_\mu(\boldsymbol{r}_i)\rangle \langle v_\mu(\boldsymbol{r}_i)|\,\hat{f}(\boldsymbol{r}_i)\,|v_\lambda(\boldsymbol{r}_i)\rangle \tag{0.0.3}$$

$$= \sum_\mu \langle v_\mu(\boldsymbol{r}_i)|\,\hat{f}(\boldsymbol{r}_i)\,|v_\lambda(\boldsymbol{r}_i)\rangle\,|v_\mu(\boldsymbol{r}_i)\rangle \tag{0.0.4}$$

が成り立つ．ここで，

$$\langle v_\mu(\boldsymbol{r})|\,\hat{f}(\boldsymbol{r})\,|v_\lambda(\boldsymbol{r})\rangle = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\ \mu^*(\boldsymbol{r})\hat{f}(\boldsymbol{r})\lambda(\boldsymbol{r}) \tag{0.0.5}$$

である．これを用いて

$$\hat{f}(\boldsymbol{r}_i)\,|n\rangle = \hat{f}(\boldsymbol{r}_i)\,|v_\alpha(\boldsymbol{r}_1), v_\beta(\boldsymbol{r}_2), \cdots, v_\lambda(\boldsymbol{r}_i), \cdots, v_\nu(\boldsymbol{r}_n)\rangle \tag{0.0.6}$$

$$= |v_\alpha(\boldsymbol{r}_1)\rangle \otimes |v_\beta(\boldsymbol{r}_2)\rangle \otimes \cdots \left(\hat{f}(\boldsymbol{r}_i)\,|v_\lambda(\boldsymbol{r}_i)\rangle\right) \cdots \otimes |v_\nu(\boldsymbol{r}_n)\rangle \tag{0.0.7}$$

$$= \sum_\mu \langle v_\mu(\boldsymbol{r}_i)|\,\hat{f}(\boldsymbol{r}_i)\,|v_\lambda(\boldsymbol{r}_i)\rangle\,|v_\alpha(\boldsymbol{r}_1), v_\beta(\boldsymbol{r}_2), \cdots, v_\mu(\boldsymbol{r}_i), \cdots, v_\nu(\boldsymbol{r}_n)\rangle \tag{0.0.8}$$

$$\tag{0.0.9}$$

を得る．ここで，

$$|v_\alpha(\boldsymbol{r}_1), v_\beta(\boldsymbol{r}_2), \cdots, v_\mu(\boldsymbol{r}_i), \cdots, v_\nu(\boldsymbol{r}_n)\rangle = \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\lambda\,|v_\alpha(\boldsymbol{r}_1), v_\beta(\boldsymbol{r}_2), \cdots, v_\lambda(\boldsymbol{r}_i), \cdots, v_\nu(\boldsymbol{r}_n)\rangle = \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\lambda\,|n\rangle \tag{0.0.10}$$

であるので，

$$\hat{F}\,|n\rangle = \sum_i \hat{f}(\boldsymbol{r}_i)\,|n\rangle \tag{0.0.11}$$

$$= \sum_i \sum_\mu \langle v_\mu(\boldsymbol{r}_i)|\,\hat{f}(\boldsymbol{r}_i)\,|v_\lambda(\boldsymbol{r}_i)\rangle\,\hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\lambda\,|n\rangle \tag{0.0.12}$$

$$= \sum_{\mu,\lambda} \sum_i \langle v_\mu(\boldsymbol{r})|\,\hat{f}(\boldsymbol{r})\,|v_\lambda(\boldsymbol{r})\rangle\,\hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\lambda\,|n\rangle \tag{0.0.13}$$

$$\tag{0.0.14}$$

となる．よって，1 粒子に作用する演算子は第 2 量子化により

$$\hat{F} = \sum_{\lambda,\mu} \langle v_\mu(\boldsymbol{r})|\,\hat{f}(\boldsymbol{r})\,|v_\lambda(\boldsymbol{r})\rangle\,\hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\lambda \tag{0.0.15}$$

と書ける．
2 つの粒子の相互作用を表す演算子

$$\hat{G} = \sum_{i \neq j} \hat{g}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j) \tag{0.0.16}$$

の第 2 量子化も同様に

$$\hat{G} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta,\lambda,\mu} \langle v_\alpha(\boldsymbol{r}_1) v_\beta(\boldsymbol{r}_2) | \, \hat{g}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \, | v_\lambda(\boldsymbol{r}_1) v_\mu(\boldsymbol{r}_2) \rangle \, \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\lambda \tag{0.0.17}$$

である．

さらに，場の演算子は座標の依存性のみを考えると，

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_i v_i(\boldsymbol{r}) \hat{a}_i, \ \psi(\boldsymbol{r})^\dagger = \sum_i v_i^*(\boldsymbol{r}) \hat{a}_i^\dagger \tag{0.0.18}$$

と書けるのであった．これを用いると $\hat{F}$ と $\hat{G}$ は

$$\hat{F} = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \, \psi^\dagger(\boldsymbol{r}) \hat{f}(\boldsymbol{r}) \psi(\boldsymbol{r}) \tag{0.0.19}$$

$$\hat{G} = \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1 \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2 \, \psi^\dagger(\boldsymbol{r}_1) \psi^\dagger(\boldsymbol{r}_2) \hat{g}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \psi(\boldsymbol{r}_2) \psi(\boldsymbol{r}_1) \tag{0.0.20}$$

と表される．確かに**式** (0.0.19) と**式** (0.0.20) に**式** (0.0.18) を代入すると，**式** (0.0.15) と**式** (0.0.17) に一致する．