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 $\Phi(\boldsymbol{r}_1$、$\boldsymbol{r}_2$、…、$\boldsymbol{r}_N)$は、任意の粒子の交換に対して不変でなくてはならない：

$$\Phi(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_i,\cdots\boldsymbol{r}_j,\cdots\boldsymbol{r}_N)=\Phi(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_j,\cdots\boldsymbol{r}_i,\cdots\boldsymbol{r}_N)\qquad(1\le i,j\le N). \tag{C.1}$$

この $\Phi(\boldsymbol{r}_1$、$\boldsymbol{r}_2$、…、$\boldsymbol{r}_N)$を、一粒子状態を表す規格化された波動関数の完全系 $\phi_1(\boldsymbol{r})$、$\phi_2(\boldsymbol{r})$、… 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次元非等的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「$\phi_1(\boldsymbol{r})$、$\phi_2(\boldsymbol{r})$、$\phi_3(\boldsymbol{r})$、… を占める粒子数が、n_1、n_2、n_3、… 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 $\Phi(\boldsymbol{r}_1$、$\boldsymbol{r}_2$、…、$\boldsymbol{r}_N)$を、

$$|\,n_1,n_2,n_3,\cdots>\quad ただし、n_1+n_2+n_3+\cdots=N \tag{C.2}$$

のように n_1、n_2、n_3、…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、$|\,n_1,n_2,n_3,\cdots>$が作る空間は**フォック(Fock)空間**と呼ばれる．$|\,n_1,n_2,n_3,\cdots>$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、

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

の N個の( )の中に、$\boldsymbol{r}_1$、$\boldsymbol{r}_2$、…、$\boldsymbol{r}_N$ 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

$$\begin{vmatrix}
\phi_1(\boldsymbol{r}_1) & \phi_1(\boldsymbol{r}_1) & \cdots & \phi_1(\boldsymbol{r}_1) & \phi_2(\boldsymbol{r}_1) & \phi_2(\boldsymbol{r}_1) & \cdots & \phi_2(\boldsymbol{r}_1) & \phi_3(\boldsymbol{r}_1) & \phi_3(\boldsymbol{r}_1) & \cdots & \phi_3(\boldsymbol{r}_1) & \cdots \\
\phi_1(\boldsymbol{r}_2) & \phi_1(\boldsymbol{r}_2) & \cdots & \phi_1(\boldsymbol{r}_2) & \phi_2(\boldsymbol{r}_2) & \phi_2(\boldsymbol{r}_2) & \cdots & \phi_2(\boldsymbol{r}_2) & \phi_3(\boldsymbol{r}_2) & \phi_3(\boldsymbol{r}_2) & \cdots & \phi_3(\boldsymbol{r}_2) & \cdots \\
\phi_1(\boldsymbol{r}_3) & \phi_1(\boldsymbol{r}_3) & \cdots & \phi_1(\boldsymbol{r}_3) & \phi_2(\boldsymbol{r}_3) & \phi_2(\boldsymbol{r}_3) & \cdots & \phi_2(\boldsymbol{r}_3) & \phi_3(\boldsymbol{r}_3) & \phi_3(\boldsymbol{r}_3) & \cdots & \phi_3(\boldsymbol{r}_3) & \cdots \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \\
\phi_1(\boldsymbol{r}_N) & \phi_1(\boldsymbol{r}_N) & \cdots & \phi_1(\boldsymbol{r}_N) & \phi_2(\boldsymbol{r}_N) & \phi_2(\boldsymbol{r}_N) & \cdots & \phi_2(\boldsymbol{r}_N) & \phi_3(\boldsymbol{r}_N) & \phi_3(\boldsymbol{r}_N) & \cdots & \phi_3(\boldsymbol{r}_N) & \cdots
\end{vmatrix}$$

$$\underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{n_1個}\quad\underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{n_2個}\quad\underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{n_3個}$$

(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 $[n_1, n_2, n_3, \cdots]$ と略記することにする．これは determinant（行列式）に対して permanent（パーマネント）と呼ばれる．最終的に、N 個のボース粒子の波動関数 $\Phi(\boldsymbol{r}_1$、$\boldsymbol{r}_2$、…、$\boldsymbol{r}_N)$ は、規格化条件

$$\int \cdots \int \left| \Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3, \cdots, \boldsymbol{r}_N) \right|^2 d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 d\boldsymbol{r}_3 \cdots d\boldsymbol{r}_N = 1 \tag{C.5}$$

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

$$\Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3, \cdots, \boldsymbol{r}_N) \equiv |\, n_1, n_2, n_3, \cdots > \, = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! n_3! \cdots N!}} [n_1, n_2, n_3, \cdots] \tag{C.6}$$

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 $\phi_1(\boldsymbol{r})$ にある場合は、

$$\Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3, \cdots, \boldsymbol{r}_N) \equiv |\, N, 0, 0, \cdots > \, = \frac{1}{N!} [N, 0, 0, \cdots] = \prod_{k=1}^{N} \phi_1(\boldsymbol{r}_k) \tag{C.7}$$

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：

$$\hat{a}_\mu \,|\, n_1, n_2, \cdots, n_\mu, \cdots > = \sqrt{n_\mu} \,|\, n_1, n_2, \cdots, n_\mu - 1, \cdots > \tag{C.8}$$

$$\hat{a}_\mu^\dagger \,|\, n_1, n_2, \cdots, n_\mu, \cdots > = \sqrt{n_\mu + 1} \,|\, n_1, n_2, \cdots, n_\mu + 1, \cdots > . \tag{C.9}$$

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、

$$\begin{aligned} \hat{a}_\mu \hat{a}_\mu^\dagger \,|\, n_1, n_2, \cdots, n_\mu, \cdots > &= \sqrt{n_\mu + 1}\, \hat{a}_\mu \,|\, n_1, n_2, \cdots, n_\mu + 1, \cdots > \\ &= n_\mu + 1 \,|\, n_1, n_2, \cdots, n_\mu, \cdots > \end{aligned} \tag{C.10}$$

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

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 ϕ_μ 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，

$$\begin{aligned}[\hat{a}_\nu(t), \hat{a}_\mu^\dagger(t)] &\equiv e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{a}_\nu e^{-i\hat{H}t/\hbar} e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{a}_\mu^\dagger e^{-i\hat{H}t/\hbar} - e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{a}_\mu^\dagger e^{-i\hat{H}t/\hbar} e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{a}_\nu e^{-i\hat{H}t/\hbar} \\ &= e^{i\hat{H}t/\hbar}[\hat{a}_\nu(t), \hat{a}_\mu^\dagger(t)] e^{-i\hat{H}t/\hbar} \\ &= \delta_{\nu\mu} \\ [\hat{a}_\nu(t), \hat{a}_\mu(t)] &= [\hat{a}_\nu^\dagger(t), \hat{a}_\mu^\dagger(t)] = 0 \;.\end{aligned} \tag{C.14}$$

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：

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

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、

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

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

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 $\hat{\Psi}(\boldsymbol{r},t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{\Psi}(\boldsymbol{r})e^{-i\hat{H}t/\hbar}$、$\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{r},t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{r})e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ でも同様に成り立つ：

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

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

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

となり、これは位置 $\boldsymbol{r}$ 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の表示

N 個のボース粒子が、共通のポテンシャル $V_{trap}(\boldsymbol{r})$ 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 $U(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)$ 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の和と、二粒子ハミルトニアンの和として次

のように表される：

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

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

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

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 $U(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)$ は、波動関数 $\phi_\mu(\boldsymbol{r}_i)\phi_\nu(\boldsymbol{r}_j)$ を以下のように二粒子状態の重ね合わせに変換する：

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

これらの関係と，パーマネント $[n_1, n_2, n_3, \cdots]$ 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、

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

となる．更に場の演算子を用いると、

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

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 $\hat{\Psi}(\boldsymbol{r},t)$ 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：

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

まず、右辺第１項目の[　]内を計算すると、

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

次に、第２項目の[　]内を計算すると、

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

$$= \frac{1}{2}\iint d\boldsymbol{r}'\, d\boldsymbol{r}''\left[\hat{\Psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}')\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'') + \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\,\hat{\Psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}'')\right] U(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'')\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}')\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}'')$$

$$= \frac{1}{2}\iint d\boldsymbol{r}'\, d\boldsymbol{r}''\,\hat{\Psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}')\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}')\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}'')\; U(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'')\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'')$$

$$+ \frac{1}{2}\iint d\boldsymbol{r}'\, d\boldsymbol{r}''\,\hat{\Psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}'')\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}'')\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}')U(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'')\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

$$= \frac{1}{2}\int d\boldsymbol{r}'\,\hat{\Psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}')\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}')\hat{\Psi}(\boldsymbol{r})\; U(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}) + \frac{1}{2}\int d\boldsymbol{r}''\,\hat{\Psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}'')\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}'')\hat{\Psi}(\boldsymbol{r})U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'')$$

$$= \left[\int d\boldsymbol{r}'\,\hat{\Psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}')\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}')U(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r})\right]\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}) \;. \tag{C.26}$$

以上の結果をまとめると，

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

となる．

　式（C.27）の右辺の積分の内に表れる演算子$\hat{\Psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}',t)\,\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}',t)$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$U(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r})$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、$U(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r})$をデルタ関数のように扱ってもよい：

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

ただし、

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

このとき，式（C.27）は以下のようになる：

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

付録 D より、U_0 は S 波散乱半径 a を用いて、

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \tag{C.31}$$

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．