

松 山 大 学 論 集  
第 30 卷 第 1 号 抜 刷  
2 0 1 8 年 4 月 発 行

## Coleman の定理に関する密度行列について

檀 裕 也

# Coleman の定理に関する密度行列について

檀 裕 也

## 1 は じ め に

量子力学における粒子（量子）の状態は、波動関数によって表現される。波動関数は、空間座標または運動量を変数とする複素数値関数であって、その絶対値の自乗は量子の確率密度を意味すると解釈されている。したがって、全空間における確率密度の積分は1と等しく、量子状態を表現する波動関数は Hilbert 空間の中で議論することができる。

量子の固有状態は、与えられた Hamilton 作用素に対する固有値および固有関数に対応している。固有値とは、その固有関数によって表現される量子状態のエネルギーに等しい。関数解析やスペクトル解析は、このような数理構造を解析できる強力な道具である。

さらに、波動関数の時間発展は、Schrödinger 方程式によって記述される。偏微分方程式の理論によって、量子状態の変化について詳細に調べることができる。

一方、量子状態を波動関数ではなく、作用素によって表現することも可能である。その作用素とは、密度行列と呼ばれ、もちろん波動関数と互換性がある。密度行列の性質を明らかにすることで、これまで波動関数によるアプローチでは見ることのできなかった数理構造に光を当てる可能性がある。

そこで、本稿では Lieb-Seiringer [12] に沿って Coleman の定理 [4] を検討する。数学上の用語および記号は、これまでに発表した紀要論文 [20, 21] のほか、Lieb-Loss [11] による標準的な解析学の記法に従った。

なお、本稿は 2016 年度松山大学国内研究の制度を利用して、2016 年 9 月から 2017 年 8 月までの一年間に学習院大学理学部において取り組んだ「数理解理学における量子多体系の安定性」に関する研究の成果の一部である。

## 2 量子多体系の数理解表現

### 2.1 波動関数

$N$  個の量子に関する状態を表す波動関数は、量子のスピンがない場合、

$$\phi : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{C} \text{ in } L^2(\mathbb{R}^{3N}) \simeq \bigotimes_{i=1}^N L^2(\mathbb{R}^3) \quad (1)$$

と考えることができる。ここで、 $i$  番目の量子の 3 次元 Euclid 空間  $\mathbb{R}^3$  における位置

$$x_i = (x_i^1, x_i^2, x_i^3) \in \mathbb{R}^3, \quad i = 1, \dots, N \quad (2)$$

に対して、 $\phi$  の Hilbert 空間  $L^2(\mathbb{R}^{3N}) \simeq \bigotimes^N L^2(\mathbb{R}^3)$  におけるノルム  $\|\phi\|$  を

$$\|\phi\|^2 = \int_{\mathbb{R}^{3N}} |\phi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \cdots dx_N \quad (3)$$

によって定義し、すべての波動関数は規格化条件  $\|\phi\| = 1$  を満たすものと仮定する。

記号を簡単にするため、

$$X = (x_1, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^3 \times \cdots \times \mathbb{R}^3 = \mathbb{R}^{3N} \quad (4)$$

および

$$dX = dx_1 \cdots dx_N \quad (5)$$

を導入すると、ノルムを定義する積分に現れた被積分関数

$$|\phi(X)|^2 = |\phi(x_1, \dots, x_N)|^2 \quad (6)$$

は、1 番目の量子が位置  $x_1$ , 2 番目の量子が位置  $x_2$ , ...,  $N$  番目の量子が位置  $x_N$  に見つかる確率密度を表すことがわかる。

ここで、粒子密度

$$\rho_\phi(x) = \sum_{i=1}^N \rho_\phi^i(x), \quad x \in \mathbb{R}^3 \quad (7)$$

を定義する。ただし,

$$\rho_\phi^i(x) = \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} |\psi(x_1, \dots, x_{i-1}, x, x_{i+1}, \dots, x_N)|^2 dx_1 \cdots \hat{dx}_i \cdots dx_N \quad (8)$$

は、 $i$  番目の量子が位置  $x$  に見つかる確率密度であって、積分記号の  $dx_1 \cdots \hat{dx}_i \cdots dx_N$  は  $X = (x_1, \dots, x_N)$  のうち  $x_i$  だけ積分から除外されることを表している。すると,

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\phi^i(x) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} |\psi(x_1, \dots, x_{i-1}, x, x_{i+1}, \dots, x_N)|^2 dx_1 \cdots \hat{dx}_i \cdots dx_N dx \\ &= \int_{\mathbb{R}^{3N}} |\psi(X)|^2 dX = 1 \end{aligned} \quad (9)$$

と規格化されていることがわかる。よって,

$$\int_{\mathbb{R}^3} \rho_\phi(x) dx = \sum_{i=1}^N \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\phi^i(x) dx = N \quad (10)$$

と、粒子密度の全空間  $\mathbb{R}^3$  における積分値は粒子数を表している。

量子にスピンなどの内部自由度がある場合、一般にスピン状態を

$$\sigma \in \{1, 2, \dots, q\} \quad (11)$$

によって区別することにする。電子は、上向きと下向きの2つのスピン状態があることから、 $q=2$  と考えればよい。以下の議論では、本来のスピンに限らず、アイソスピンやフレーバーなどの内部自由度を含む形で一般化したスピン

について考えることにする。

$i$  番目の量子のスピン状態が  $q_i$  であるとき、波動関数  $\psi$  は

$$\psi(x_1, \sigma_1; \dots; x_N, \sigma_N) \in L^2(\mathbb{R}^{3N}), 1 \leq \sigma_i \leq q_i \quad (12)$$

は、 $\mathbb{C}^q$  に値をとる関数となる。ただし、

$$Q = \prod_{i=1}^N q_i \quad (13)$$

である。すなわち、

$$\psi \in L^2(\mathbb{R}^{3N}; \mathbb{C}^Q) \simeq \bigotimes_{i=1}^N L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^{q_i}) \quad (14)$$

という Hilbert 空間で波動関数を考えることと同値である。いま

$$\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_N) \quad (15)$$

および

$$\sum_{\sigma} = \sum_{\sigma_1=1}^{q_1} \cdots \sum_{\sigma_N=1}^{q_N} \quad (16)$$

という記法を導入すると、 $\psi(X, \sigma)$  はスピンを含む量子の状態を記述する波動関数である。

もうひとつ別の記法を導入する。ひとつの量子の位置とスピンを合わせた座標

$$z_i = (x_i, \sigma_i), \quad i = 1, \dots, N \quad (17)$$

および

$$z = (z_1, \dots, z_N) \quad (18)$$

を使って

$$\int f(z_i) dz_i = \sum_{\sigma_i=1}^{q_i} \int_{\mathbb{R}^3} f(x_i, \sigma_i) dx_i \quad (19)$$

と書くことにすると、 $\phi(z) = \phi(z_1, \dots, z_N)$  は

$$\|\phi\|^2 = \int |\phi(z)|^2 dz = \sum_{\sigma} \int_{\mathbb{R}^{3N}} |\phi(X, \sigma)|^2 dX = 1 \quad (20)$$

となって、やはり規格化条件を満たしていることが確認できる。

## 2.2 Bose 粒子と Fermi 粒子

量子力学では、同種粒子を区別しない（できない）という本質的に大きな特徴がある。このような量子統計の性質から、量子は Bose 粒子と Fermi 粒子に分類される。Bose 粒子とは、量子の入れ替えに関して波動関数が対称であること、すなわち

$$\phi(\dots, z_i, \dots, z_j, \dots) = \phi(\dots, z_j, \dots, z_i, \dots) \quad (21)$$

がすべての  $i, j = 1, \dots, N$  に対して成り立つことである。より一般に、量子の入れ替えに関する任意の置換  $\pi \in S_N$  に対して

$$\pi\phi(z_1, \dots, z_N) = \phi(z_{\pi(1)}, \dots, z_{\pi(N)}) = \phi(z_1, \dots, z_N) \quad (22)$$

が成り立つ。ただし、 $S_N$  は置換  $\pi: \{1, \dots, N\} \rightarrow \{1, \dots, N\}$  を要素とする対称群を表す。

一方、Fermi 粒子は

$$\phi(\dots, z_i, \dots, z_j, \dots) = -\phi(\dots, z_j, \dots, z_i, \dots) \quad (23)$$

がすべての  $i, j = 1, \dots, N$  に対して成り立つ。 $z_i = z_j$  のとき

$$\phi(\dots, z_i, \dots, z_j, \dots) = 0 \quad (24)$$

であるから、2つの粒子が同じ量子状態になることはないという Pauli の排他原理を表している。より一般に、量子の入れ替えに関する任意の置換  $\pi \in S_N$  に対して

$$\pi\psi(z_1, \dots, z_N) = \psi(z_{\pi(1)}, \dots, z_{\pi(N)}) = (-1)^{|\pi|} \psi(z_1, \dots, z_N) \quad (25)$$

が成り立つ。ただし、 $|\pi|$  は置換  $\pi$  の長さを表す整数である。

### 2.3 密度行列

波動関数  $\psi \in L^2(\mathbb{R}^{3N}; \mathbb{C}^{q^N}) \simeq \bigotimes_{i=1}^N L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^q)$  に対して、関数空間  $L^2(\mathbb{R}^{3N}; \mathbb{C}^{q^N})$  上の直交射影  $\Gamma_\psi$  を定義する。すなわち、

$$\Gamma_\psi : L^2(\mathbb{R}^{3N}; \mathbb{C}^{q^N}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^{3N}; \mathbb{C}^{q^N}) \quad (26)$$

を

$$\Gamma_\psi \phi(z) = (\phi, \psi) \psi(z) \quad (27)$$

によって定める。ただし、

$$(\phi, \psi) = \int \overline{\psi(z)} \phi(z) dz \quad (28)$$

は Hilbert 空間  $L^2(\mathbb{R}^{3N}; \mathbb{C}^{q^N})$  における内積である。また、 $\overline{\psi(z)}$  は  $\psi(z)$  の複素共役である。

上の手順によって定義された密度行列  $\Gamma = \Gamma_\psi$  は、次の性質を満たす：

- 線形性

$$\forall c, c' \in \mathbb{C}, \forall \phi, \phi' \in L^2(\mathbb{R}^{3N}; \mathbb{C}^{q^N}); \Gamma(c\phi + c'\phi') = c\Gamma\phi + c'\Gamma\phi'$$

- 自己共役性

$$\Gamma^* = \Gamma, \text{ i. e. } \forall \phi, \phi' \in L^2(\mathbb{R}^{3N}; \mathbb{C}^{q^N}); (\Gamma\phi, \phi') = (\phi, \Gamma\phi')$$

- 正定値性

$$\forall \phi \in L^2(\mathbb{R}^{3N}; \mathbb{C}^{q^N}); (\phi, \Gamma \phi) \geq 0$$

- 単位跡 (トレース)

$$\text{Tr } \Gamma = 1$$

- 単位固有値

$$\Gamma \phi = \phi$$

逆に、このような性質を満たす密度行列  $\Gamma$  は固有値 1 に対応した固有関数  $\phi$  を使って、

$$(\Gamma \phi)(z) = (\phi, \phi) \phi(z) \quad \text{for } \phi \in L^2(\mathbb{R}^{3N}; \mathbb{C}^{q^N}) \quad (29)$$

と表現することができる。このような密度行列を純粋状態の密度行列と呼ぶことがある。

一般の密度行列  $\Gamma$  は、上の性質のうち、単位固有値の条件を除外したものとして考えることができる。実際、

$$\Gamma \phi_j = \lambda_j \phi_j, \quad j = 1, 2, \dots \quad (30)$$

を満たす固有値

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq 0 \quad (31)$$

および固有関数

$$\phi_1, \phi_2, \dots \in L^2(\mathbb{R}^{3N}; \mathbb{C}^{q^N}) \quad (32)$$

に対して、固有関数列は正規直交系をなすとともに



$$\sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j = \text{Tr } \Gamma = 1 \quad (33)$$

となっていることから,

$$\Gamma = \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j \Gamma_{\phi_j} \quad (34)$$

のように凸結合の形式で固有関数展開を表現することができる。

純粋状態に対する密度行列  $\Gamma = \Gamma_{\phi}$  に対して

$$(\Gamma\phi)(z) = (\phi, \phi)\phi(z) = \int \phi(z) \overline{\phi(z')} \phi(z') dz' \quad (35)$$

であることから, 積分核 (カーネル) として

$$\Gamma(z, z') = \phi(z) \overline{\phi(z')} \quad (36)$$

と取ることによって,

$$(\Gamma\phi)(z) = \int \Gamma(z, z') \phi(z') dz' \quad (37)$$

のように積分形式で表示することも可能である。一般に,

$$\Gamma = \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j \Gamma_{\phi_j} \quad (38)$$

の場合は,

$$\Gamma(z, z') = \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j \phi_j(z) \overline{\phi_j(z')} \quad (39)$$

と積分核 (カーネル) を取れることがわかる。

ここで,  $k = 1, 2, \dots, N-1$  に対して

$$\begin{aligned} & \gamma^{(k)}(z_1, \dots, z_k; z'_1, \dots, z'_k) \\ &= \frac{N!}{(N-k)!} \int \Gamma(\underline{z}^{(k)}, \underline{z}^{(N-k)}; \underline{z}'^{(k)}, \underline{z}'^{(N-k)}) d\underline{z}^{(N-k)} \end{aligned} \quad (40)$$

および

$$\underline{z}^{(k)} = (z_1, \dots, z_k), \quad \underline{z}^{(N-k)} = (z_{k+1}, \dots, z_N) \quad (41)$$

$$\underline{z}'^{(k)} = (z'_1, \dots, z'_k), \quad d\underline{z}^{(N-k)} = dz_{k+1} \dots dz_N \quad (42)$$

と置き,

$$(\gamma^{(k)}\phi)(z) = \int \gamma^{(k)}(z, z')\phi(z') dz' \quad (43)$$

によって定義される作用素を  $k$  次の縮約密度行列と呼ぶ。縮約密度行列  $\gamma = \gamma^{(k)}$  は, 次の性質を満たす:

- 線形性

$$\forall c, c' \in \mathbb{C}, \forall \phi, \phi' \in L^2(\mathbb{R}^{3k}; \mathbb{C}^{q^k}); \gamma(c\phi + c'\phi') = c\gamma\phi + c'\gamma\phi'$$

- 自己共役性

$$\gamma^* = \gamma, \quad \text{i. e. } \forall \phi, \phi' \in L^2(\mathbb{R}^{3k}; \mathbb{C}^{q^k}); (\gamma\phi, \phi') = (\phi, \gamma\phi')$$

- 正定値性

$$\forall \phi \in L^2(\mathbb{R}^{3k}; \mathbb{C}^{q^k}); (\phi, \gamma\phi) \geq 0$$

- 跡 (トレース)

$$\text{Tr } \gamma = \frac{N!}{(N-k)!} \neq 1$$

いま,  $N$  個の正規直交基底

$$u_1, u_2, \dots, u_N \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^q) \quad (44)$$

を用いて

$$\phi(z) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\{u_i(z_j)\}_{i,j=1}^N \quad (45)$$

と Slater の行列式を構成すると、もちろん

$$\Gamma_\psi(z, z') = \phi(z) \overline{\phi(z')} \quad (46)$$

であるが、その縮約密度行列  $\gamma^{(k)}$  について

$$\begin{aligned} & \gamma^{(k)}(z_1, \dots, z_k; z'_1, \dots, z'_k) \\ &= k! \sum_{\tau} \frac{1}{\sqrt{k!}} \det\{u_{\tau(i)}(z_j)\}_{i,j=1}^k \cdot k! \sum_{\tau} \frac{1}{\sqrt{k!}} \det\{\overline{u_{\tau(i)}(z'_j)}\}_{i,j=1}^k \end{aligned} \quad (47)$$

と書くことができる。ただし、

$$\tau: \{1, \dots, k\} \rightarrow \{1, \dots, N\} \quad (48)$$

は置換であって、上の式における和は

$$\binom{N}{k} = \frac{N!}{k!(N-k)!} \quad (49)$$

の可能な場合について足し合わせるものと約束する。なお、Slater の行列式は、粒子の入れ替えに関して反対称という性質があつて、Fermi 統計に従うことがわかる。

特に、

$$\gamma^{(1)}(z, z') = \sum_{i=1}^N u_i(z) \overline{u_i(z')} \quad (50)$$

とともに

$$\gamma^{(2)}(z_1, z_2; z'_1, z'_2) = \gamma^{(1)}(z_1, z'_1) \gamma^{(1)}(z_2, z'_2) - \gamma^{(1)}(z_1, z'_2) \gamma^{(1)}(z_2, z'_1) \quad (51)$$

が成立する。

より一般に、クーロン相互作用など 2 体間の相互作用を考えればよい量子多体系において、1 次の縮約密度行列は量子状態を表現するだけの情報を持ち合わせていることが知られている。

$\phi \in L^2(\mathbb{R}^{3k}; \mathbb{C}^{q^k})$  に対して

$$\begin{aligned}
 & (\gamma^{(k)}\phi)(z_1, \dots, z_k) \\
 &= \int \gamma^{(k)}(z_1, \dots, z_k; z'_1, \dots, z'_k) \phi(z'_1, \dots, z'_k) dz'_1 \cdots dz'_k \\
 &= \frac{N!}{(N-k)!} \int \Gamma(\underline{z}^{(k)}, \underline{z}^{(N-k)}; \underline{z}'^{(k)}, \underline{z}'^{(N-k)}) \phi(\underline{z}'^{(k)}) d\underline{z}^{(N-k)} d\underline{z}'^{(k)} \\
 &= \frac{N!}{(N-k)!} \left( \text{Tr}^{(N-k)} \Gamma \phi \right) (\underline{z}^{(k)})
 \end{aligned} \tag{52}$$

と書いて、部分跡（トレース）

$$\gamma^{(k)} = \frac{N!}{(N-k)!} \text{Tr}^{(N-k)} \Gamma \tag{53}$$

を導入する。

### 3 Coleman の定理

**定理 1** (Coleman [4]).  $\gamma$  は  $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^q)$  上で自己共役かつ正定値の作用素で、ある整数  $N \geq 1$  があって

$$\text{Tr } \gamma = N \tag{54}$$

を満たすと仮定する。そのとき、Fermi 統計に従う  $N$  粒子系の密度行列  $\Gamma \in L^2(\mathbb{R}^{3N}; \mathbb{C}^{q^N})$  が存在して

$$\gamma = N \text{Tr}^{(N-1)} \Gamma \tag{55}$$

とできるための必要十分条件は

$$\gamma \leq 1 \quad (56)$$

である。

Coleman の定理は 1963 年の論文 [4] で述べられたものである。1960 年に発表された Kuhn の論文 [10] で離散数学における組み合わせの観点から証明が試みられているほか、物理学的な意味を含めて 1939 年には Watanabe の論文 [19] でも言及されている。しかし、無限個の固有値がある場合を含めて数学的に厳密な証明を与えたのは 2010 年に出版された Lieb-Seiringer の著書 [12] が初めてである。

Coleman の定理における条件(56)の必要性は、生成作用素および消滅作用素を用いた議論から導くことが容易であるため、本稿ではその十分性、すなわち

$$\gamma \leq 1 \Rightarrow \exists \Gamma \in L^2(\mathbb{R}^{3N}; \mathbb{C}^{q^N}) \text{ s. t. } \gamma = N \text{Tr}^{(N-1)} \Gamma \quad (57)$$

の証明について検討する。

**補題 1.**  $M \in \mathbb{N} \cup \{\infty\}$  とする。無限数列  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$  が  $0 \leq \varepsilon_j \leq 1$  を満たすならば

$$\sum_{k=1}^M \varepsilon_k \prod_{j=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_j) = 1 - \prod_{j=1}^M (1 - \varepsilon_j) \quad (58)$$

が成立する。

*Proof.*  $M \in \mathbb{N} = \{1, 2, \dots\}$  のとき、一般の数列  $\{a_0, a_1, a_2, \dots\}$  に対して

$$\sum_{k=1}^M (a_{k-1} - a_k) = a_0 - a_M \quad (59)$$

が成り立つ。いま

$$\alpha_k = \begin{cases} \prod_{j=1}^k (1 - \varepsilon_j) & k = 1, 2, \dots, M \\ 1 & k = 0 \end{cases} \quad (60)$$

と置くと,

$$\alpha_{k-1} - \alpha_k = \prod_{j=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_j) - (1 - \varepsilon_k) \prod_{j=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_j) = \varepsilon_k \prod_{j=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_j) \quad (61)$$

を得るが,

$$\alpha_0 - \alpha_1 = 1 - (1 - \varepsilon_1) = \varepsilon_1 \quad (62)$$

であるから, 補題の主張は正しい。 $M \in \mathbb{N} \cup \{\infty\}$  のとき, 任意の  $M \in \mathbb{N} = \{1, 2, \dots\}$  に対して

$$1 - \prod_{j=1}^M (1 - \varepsilon_j) \leq 1 \quad (63)$$

となることに注意すると, 無限数列

$$\left\{ \sum_{k=1}^M \varepsilon_k \prod_{j=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_j) \right\}_{M=1}^{\infty} \quad (64)$$

は 1 を超えない増加列であるため, 実数  $\mathbb{R}$  における極限の性質から, ある値に収束する。その値を

$$\sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon_k \prod_{j=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_j) \quad (65)$$

と書けばよい。ゆえに, 補題は証明された。  $\square$

上の補題から, 次の系が成り立つことがわかる。

**系 1.**

$$c_k = \varepsilon_k \prod_{j=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_j) \quad (66)$$

のとき

$$\sum_{k=1}^{\infty} c_k \leq 1 \quad (67)$$

が成立する。

*Proof.* 任意の  $M \in \mathbb{N}$  に対して

$$\sum_{k=1}^M c_k = \sum_{k=1}^M \varepsilon_k \prod_{j=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_j) = 1 - \prod_{j=1}^M (1 - \varepsilon_j) \leq 1 \quad (68)$$

だから、無限数列

$$\left\{ \sum_{k=1}^M \varepsilon_k \prod_{j=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_j) \right\}_{M=1}^{\infty} \quad (69)$$

は1を超えない増加列である。よって

$$\exists \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^M c_k \leq 1 \quad (70)$$

を満たす。 □

**補題2.**  $0 \leq r_j^{(M)} \leq 1$  に対して

$$R_j^{(M)} = r_j^{(M)} \prod_{i=1}^M (1 - \varepsilon_i) \geq 0 \quad (71)$$

と置くと、次の関係が成立する：

$$\exists R = \{R_j\} \quad \text{s. t.} \quad \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^{\infty} |R_j^{(M)} - R_j| = 0 \quad (72)$$

*Proof.* まず

$$R_j^{(M)} = \lambda_j - \sum_{k=1}^M c_k \chi_k(j) \quad (73)$$

から出発する。 $c_k \chi_k(j) \geq 0$  だから、任意の  $j = 1, 2, \dots$  に対して

$$R_j^{(1)} \geq R_j^{(2)} \geq \dots \geq R_j^{(M)} \geq \dots \geq 0 \quad (74)$$

と  $M$  に関する減少列であって、下限が存在することに注意すると、実数  $\mathbb{R}$  における極限の性質から

$$\exists R_j \geq 0 \quad \text{s. t.} \quad R_j^{(M)} \rightarrow R_j \geq 0, \quad \text{as } M \rightarrow \infty \quad (75)$$

が成り立つことがわかる。

$$R_j = \lim_{M \rightarrow \infty} R_j^{(M)} = \lambda_j - \sum_{k=1}^{\infty} c_k \chi_k(j) \quad (76)$$

に対して,

$$R_j^{(M)} - R_j = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \chi_k(j) - \sum_{k=1}^M c_k \chi_k(j) = \sum_{k=M+1}^{\infty} c_k \chi_k(j) \geq 0 \quad (77)$$

よって

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{\infty} |R_j^{(M)} - R_j| &= \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=M+1}^{\infty} c_k \chi_k(j) \\ &= \sum_{k=M+1}^{\infty} c_k \sum_{j=1}^{\infty} \chi_k(j) \\ &= N \sum_{k=M+1}^{\infty} c_k \rightarrow 0, \quad \text{as } M \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (78)$$

□

**補題 3.**

$$d = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \quad (79)$$

と置くと、次の関係が成立する：

$$\sum_{j=1}^{\infty} R_j = N(1-d) \quad (80)$$

*Proof.* まず

$$R_j^{(M)} = \lambda_j - \sum_{k=1}^M c_k \chi_k(j) \quad (81)$$

から出発すると、任意の  $M = 1, 2, \dots$  に対して

$$\sum_{j=1}^{\infty} R_j^{(M)} = \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j - \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^M c_k \chi_k(j) = N(1-d) \quad (82)$$

が成立する。補題 2 より、任意の  $j = 1, 2, \dots$  に対して、 $M$  に関する数列



$\{R_j^{(M)}\}_{M=1}^\infty$  は  $R_j$  に強収束するので,

$$\sum_{j=1}^\infty R_j = \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^\infty R_j^{(M)} = N(1-d) \quad (83)$$

である。 □

**補題 4.** 任意の  $M \in \mathbb{N}$  に対して

$$R_j^{(M)} \leq 1 - \sum_{k=1}^M c_k \quad (84)$$

*Proof.* 仮定と補題 1 より

$$\begin{aligned} R_j^{(M)} + \sum_{k=1}^M c_k &= r_j^{(M)} \prod_{i=1}^M (1 - \varepsilon_i) + \sum_{k=1}^M \varepsilon_k \prod_{i=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_i) \\ &= r_j^{(M)} \prod_{i=1}^M (1 - \varepsilon_i) + 1 - \prod_{j=1}^M (1 - \varepsilon_j) \\ &= 1 - (1 - r_j^{(M)}) \prod_{i=1}^M (1 - \varepsilon_i) \leq 1 \end{aligned} \quad (85)$$

となることから明らか。 □

上の補題から次の系が成り立つことが容易にわかる。

**系 2.**

$$R_j \leq 1 - d \quad (86)$$

### 3.1 Coleman の定理の証明

*Proof.* 仮定の縮約密度行列

$$\gamma: L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^q) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^q) \quad (87)$$

の固有値  $\lambda_j \in \mathbb{R}$  に対応する固有関数を  $u_j \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^q)$  とすると,

$$\gamma u_j = \lambda_j u_j, \quad j = 1, 2, \dots \quad (88)$$

と書いて, 固有関数は正規直交系

$$(u_j, u_k) = \begin{cases} 0 & \text{for } j \neq k \\ 1 & \text{for } j = k \end{cases} \quad (89)$$

を形成し, 固有値は

$$0 \leq \lambda_j \leq 1, \quad j = 1, 2, \dots, \quad (90)$$

$$\sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j = N \quad (91)$$

および

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \quad (92)$$

を満たすように取ることができる。以下の議論では,  $\lambda = \{\lambda_j\}_{j=1}^{\infty}$  に対して条件 (90) および (91) を満たすとき

$$\lambda \in \mathcal{F}_N \quad (93)$$

と書き, さらに条件 (92) を満たすとき

$$\lambda \in \tilde{\mathcal{F}}_N \quad (94)$$

のように記すことと約束する。

次に

$$\varepsilon = \min \{ \lambda_N, 1 - \lambda_{N+1} \} \quad (95)$$

と取ると,  $0 < \varepsilon < 1$  である。無限数列の変換

$$T_\varepsilon : \lambda \mapsto f \quad (96)$$

について,

$$\lambda_j = \varepsilon \chi_{[1, N]}(j) + (1 - \varepsilon) f_j, \quad j = 1, 2, \dots \quad (97)$$

すなわち

$$f_j = \frac{\lambda_j - \varepsilon \chi_{[1, N]}(j)}{1 - \varepsilon} \quad (98)$$

と定義する。ただし,

$$\chi_{[1, N]}(j) = \begin{cases} 1 & (j = 1, \dots, N) \\ 0 & (j = N+1, N+2, \dots) \end{cases} \quad (99)$$

である。すると,  $f \in \mathcal{F}_N$  すなわち

$$0 \leq f_j \leq 1, \quad j = 1, 2, \dots, \quad \sum_{j=1}^{\infty} f_j = N \quad (100)$$

となることがわかるので,

$$T_\varepsilon : \tilde{\mathcal{F}}_N \rightarrow \mathcal{F}_N \quad (101)$$

と言える。いま, 以下の議論において一般性を失うことなく  $\varepsilon = \lambda_N$  すなわち  $\lambda_N + \lambda_{N+1} \leq 1$  と仮定して, 置換  $\tau : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N} \setminus \{N\}$  によって  $\tau : f \mapsto \tilde{f}$  すなわち

$$\tilde{f}_1 \geq \tilde{f}_2 \geq \dots, \quad \tilde{f} \in \tilde{\mathcal{F}}_N \subset \mathcal{F}_N \quad (102)$$

と並べ替えられるようにする。その際,  $\tilde{f}_j = f_{\tau(j)}$  の逆置換として  $\sigma$  を

$$f_j = \begin{cases} \tilde{f}_{\sigma(j)} & (j \neq N) \\ 0 & (j = N) \end{cases} \quad (103)$$

のように導入する。 $\varepsilon = \lambda_{N+1}$  すなわち  $\lambda_N + \lambda_{N+1} > 1$  となる場合は, 除外集合の構成について  $N$  から  $N+1$  へと変えればよい。

$\lambda$  に対して行った操作と同様に  $\tilde{f}$  を操作する。同じように

$$\varepsilon_2 = \min\{\tilde{f}_N, 1 - \tilde{f}_{N+1}\} \quad (104)$$

と取ると,  $0 < \varepsilon_2 < 1$  である。無限数列の変換

$$T_{\varepsilon_2} : \tilde{f} \mapsto f^{(2)} \quad (105)$$

について,

$$\tilde{f}_j = \varepsilon_2 \chi_{[1, N]}(j) + (1 - \varepsilon_2) f_j^{(2)}, \quad j = 1, 2, \dots, \quad (106)$$

とすることができる。ここで,  $j = N$  のとき,

$$f_N = \varepsilon_2 \chi_{[1, N]}(N) + (1 - \varepsilon_2) f_N^{(2)} = \varepsilon_2 \quad (107)$$

という自明な関係式が得られる。そこで, 一般に  $j \neq N$  のとき, 逆置換  $\sigma = \tau^{-1}$  を用いると,

$$f_j = \tilde{f}_{\sigma(j)} = \varepsilon_2 \chi_{[1, N]}(\sigma(j)) + (1 - \varepsilon_2) f_{\sigma(j)}^{(2)}, \quad j = 1, 2, \dots, \quad (108)$$

と書けるので,  $\chi_2(j) = \chi_{[1, N]}(\sigma(j))$  および  $\chi_1(j) = \chi_{[1, N]}(j)$  を使って

$$\begin{aligned} \lambda_j &= \varepsilon_1 \chi_{[1, N]}(j) + f_j (1 - \varepsilon_1) \\ &= \varepsilon_1 \chi_1(j) + f_j (1 - \varepsilon_1) \\ &= \varepsilon_1 \chi_1(j) + (\varepsilon_2 \chi_2(j) + (1 - \varepsilon_2) f_{\sigma(j)}^{(2)}) (1 - \varepsilon_1) \\ &= \sum_{k=1}^2 \varepsilon_k \prod_{i=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_i \chi_k(j)) + f_{\sigma_1(j)}^{(2)} \prod_{i=1}^2 (1 - \varepsilon_i) \end{aligned} \quad (109)$$

ただし,

$$\begin{cases} \varepsilon & \rightarrow \varepsilon_1 \\ \sigma & \rightarrow \sigma_1 \\ \tau & \rightarrow \tau_1 \\ f & \rightarrow f^{(1)} \end{cases} \quad (110)$$

と記法を統一した。いま, 置換  $\tau_2 : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N} \setminus \{N\}$  によって  $\tau_2 : f^{(2)} \mapsto \tilde{f}^{(2)}$  すなわち

$$\tilde{f}_1^{(2)} \geq \tilde{f}_2^{(2)} \geq \cdots, \quad \tilde{f}^{(2)} \in \tilde{\mathcal{F}}_N \subset \mathcal{F}_N \quad (111)$$

と並べ替える。その際、 $\tilde{f}_j^{(2)} = f_{\tau_2(j)}^{(2)}$  の逆置換として  $\sigma_2$  を

$$f_j^{(2)} = \begin{cases} \tilde{f}_{\sigma_2(j)}^{(2)} & (j \neq N) \\ 0 & (j = N) \end{cases} \quad (112)$$

のように導入できる。この関係式は

$$f_{\sigma_1(j)}^{(2)} = \begin{cases} \tilde{f}_{\sigma_2(\sigma_1(j))}^{(2)} & (j \neq N, N+1) \\ 0 & (j = N+1) \end{cases} \quad (113)$$

と考えてもよい。すると、 $\chi_1(N+1) = 0$  および  $\chi_2(N+1) = 1$  だから

$$\lambda_{N+1} = \sum_{k=1}^2 \varepsilon_k \prod_{i=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_k) \chi_k(N+1) = \varepsilon_2 (1 - \varepsilon_1) \quad (114)$$

という関係は

$$\varepsilon_2 = \frac{\lambda_{N+1}}{1 - \varepsilon_1} = f_{N+1} = \tilde{f}_N \quad (115)$$

とも書けるから自明である。

念のため、もう一回りだけ逐次法を続ける。すなわち、 $\tilde{f}^{(1)} = \tilde{f}$  に対して行った操作と同様に  $\tilde{f}^{(2)}$  を操作する。同じように

$$\varepsilon_3 = \min \{ \tilde{f}_N^{(2)}, 1 - \tilde{f}_{N+1}^{(2)} \} \quad (116)$$

と取ると、 $0 < \varepsilon_3 < 1$  である。無限数列の変換

$$T_{\varepsilon_3} : \tilde{f}^{(2)} \mapsto f^{(3)} \quad (117)$$

について、

$$\tilde{f}_j^{(2)} = \varepsilon_3 \chi_{[1, N]}(j) + (1 - \varepsilon_3) f_j^{(3)}, \quad j = 1, 2, \dots \quad (118)$$

とすることが出来る。ここで、 $j \neq N, N+1$  のとき、逆置換  $\sigma_2 = \tau_2^{-1}$  を用いると、

$$f_j^{(2)} = \tilde{f}_{\sigma_2(j)}^{(2)} = \varepsilon_3 \chi_{[1, N]}(\sigma_2(j)) + (1 - \varepsilon_3) f_{\sigma_2(j)}^{(3)}, \quad j = 1, 2, \dots \quad (119)$$

と書けるので、さらに  $\chi_3(j) = \chi_{[1, N]}(\sigma_2(j))$  を使って

$$\begin{aligned} \lambda_j &= \sum_{k=1}^2 \varepsilon_k \prod_{i=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_i \chi_k(j)) + f_{\sigma_1(j)}^{(2)} \prod_{i=1}^2 (1 - \varepsilon_i) \\ &= \sum_{k=1}^2 \varepsilon_k \prod_{i=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_i \chi_k(j)) + \left( \varepsilon_3 \chi_{[1, N]}(\sigma_2 \sigma_1(j)) + (1 - \varepsilon_3) f_{\sigma_2 \sigma_1(j)}^{(3)} \right) \prod_{i=1}^2 (1 - \varepsilon_i) \\ &= \sum_{k=1}^3 \varepsilon_k \prod_{i=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_i \chi_k(j)) + f_{\sigma_2 \sigma_1(j)}^{(3)} \prod_{i=1}^3 (1 - \varepsilon_i) \end{aligned} \quad (120)$$

いま、置換  $\tau_3: \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N} \setminus \{N\}$  によって  $\tau_3: f^{(3)} \mapsto \tilde{f}^{(3)}$  すなわち

$$\tilde{f}_1^{(3)} \geq \tilde{f}_2^{(3)} \geq \dots, \quad \tilde{f}^{(3)} \in \tilde{\mathcal{F}}_N \subset \mathcal{F}_N \quad (121)$$

と並べ替える。その際、 $\tilde{f}_j^{(3)} = f_{\tau_3(j)}^{(3)}$  の逆置換として  $\sigma_3$  を

$$f_j^{(3)} = \begin{cases} \tilde{f}_{\sigma_3(j)}^{(3)} & (j \neq N) \\ 0 & (j = N) \end{cases} \quad (122)$$

のように導入できる。この関係式は

$$f_{\sigma_2 \sigma_1(j)}^{(3)} = \begin{cases} \tilde{f}_{\sigma_3 \sigma_2 \sigma_1(j)}^{(3)} & (j \neq N, N+1, N+2) \\ 0 & (j = N+2) \end{cases} \quad (123)$$

と考えてもよい。

一般の  $M = 1, 2, \dots$  に対して、 $\tilde{f}^{(M-1)}$  から  $\tilde{f}^{(M)}$  を生成する操作について述べる。これまでと同じように

$$\varepsilon_M = \min \{ \tilde{f}_N^{(M-1)}, 1 - \tilde{f}_{N+1}^{(M-1)} \} \quad (124)$$

と取ると,  $0 < \varepsilon_M < 1$  である。無限数列の変換

$$T_{\varepsilon_M} : \tilde{f}^{(M-1)} \mapsto f^{(M)} \quad (125)$$

について,

$$\tilde{f}_j^{(M-1)} = \varepsilon_M \chi_{[1, N]}(j) + (1 - \varepsilon_M) f_j^{(M)}, \quad j = 1, 2, \dots \quad (126)$$

とすることができる。ここで,  $j \neq N, N+1, \dots, N+M-2$  のとき, 逆置換  $\sigma_{M-1} = \tau_{M-1}^{-1}$  を用いると,

$$f_j^{(M-1)} = \tilde{f}_{\sigma_{M-1}(j)}^{(M-1)} = \varepsilon_M \chi_{[1, N]}(\sigma_{M-1}(j)) + (1 - \varepsilon_M) f_{\sigma_{M-1}(j)}^{(M)}, \quad j = 1, 2, \dots \quad (127)$$

と書けるので, さらに  $\chi_M(j) = \chi_{[1, N]}(\sigma_{M-1}\sigma_{M-2}\cdots\sigma_1(j))$  を使って

$$\begin{aligned} \lambda_j &= \sum_{k=1}^{M-1} \varepsilon_k \prod_{i=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_i \chi_k(j)) + f_{\sigma_{M-1}(j)}^{(M-1)} \prod_{i=1}^{M-1} (1 - \varepsilon_i) \\ &= \sum_{k=1}^M \varepsilon_k \prod_{i=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_i \chi_k(j)) + f_{\sigma_{M-1}\sigma_{M-2}\cdots\sigma_1(j)}^{(M)} \prod_{i=1}^M (1 - \varepsilon_i) \end{aligned} \quad (128)$$

いま, 置換  $\tau_M : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N} \setminus \{N\}$  によって  $\tau_M : f^{(M)} \mapsto \tilde{f}^{(M)}$  すなわち

$$\tilde{f}_1^{(M)} \geq \tilde{f}_2^{(M)} \geq \dots, \quad \tilde{f}^{(M)} \in \tilde{\mathcal{F}}_N \subset \mathcal{F}_N \quad (129)$$

と並べ替える。その際,  $\tilde{f}_j^{(M)} = f_{\tau_M(j)}^{(M)}$  の逆置換として  $\sigma_M$  を

$$f_j^{(M)} = \begin{cases} \tilde{f}_{\sigma_M(j)}^{(M)} & (j \neq N) \\ 0 & (j = N) \end{cases} \quad (130)$$

のように導入できる。この関係式は

$$f_{\sigma_{M-1}\cdots\sigma_1(j)}^{(M)} = \begin{cases} \tilde{f}_{\sigma_M\sigma_{M-1}\cdots\sigma_1(j)}^{(M)} & (j \neq N, N+1, \dots, N+M-1) \\ 0 & (j = N+M-1) \end{cases} \quad (131)$$

と考えてもよい。

ここで,

$$d = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \quad (132)$$

に対し,  $d=1$  となることを背理法によって示す。もし  $d < 1$  であると仮定する。任意の  $j=1, 2, \dots$  を固定して

$$r_j^{(M)} = f_{\sigma_{M-1}\sigma_{M-2}\cdots\sigma_1(j)}^{(M)} \quad (133)$$

と置くと,  $r^{(M)} \in \mathcal{F}_N$  だから,

$$\exists \tau: \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N} \setminus \{N\} \quad \text{s. t.} \quad \tilde{r}_j^{(M)} = r_{\tau(j)}^{(M)}, \quad \tilde{r}^{(M)} \in \tilde{\mathcal{F}}_N \quad (134)$$

とできる。一方,

$$R_j^{(M)} = r_j^{(M)} \prod_{i=1}^M (1 - \varepsilon_i) \geq 0 \quad (135)$$

と置くと, 補題 2 から

$$\exists R_j = \lim_{M \rightarrow \infty} R_j^{(M)} \quad (136)$$

がわかるので,

$$r_j = \frac{R_j}{1-d} \quad (137)$$

と置くと, 補題から  $r \in \mathcal{F}_N$  となることがわかるので

$$\exists \tau: r_j \mapsto \tilde{r}_j \in \tilde{\mathcal{F}}_N \quad (138)$$

を使って

$$\tilde{r}_j^{(M)} = r_{\tau(j)}^{(M)} \quad (139)$$



と置くと, 一般に  $\tilde{r}^{(M)} \in \tilde{\mathcal{F}}_N$  であるが<sup>s</sup>

$$\exists \tilde{r}_j = \lim_{M \rightarrow \infty} \tilde{r}_j^{(M)} \quad (140)$$

と書くことができる。したがって,  $\forall M \geq M_0$  に対して

$$\tilde{r}_j^{(M)} \geq \frac{\tilde{r}_j}{2} \quad (141)$$

を満たすような  $M_0 \in \mathbb{N}$  が存在する。よって,

$$\tilde{r}_N^{(M)} \geq \frac{\tilde{r}_N}{2} > 0 \quad (142)$$

を得ることから, 十分に大きな  $M$  に対して

$$\varepsilon_M = \min\{\tilde{r}_N^{(M)}, 1 - \tilde{r}_{N+1}^{(M)}\} = \min\left\{\frac{\tilde{r}_j}{2}, \frac{1}{N+1}\right\} > 0 \quad (143)$$

が成立する。ゆえに, 補題1の恒等式

$$\sum_{k=1}^M \varepsilon_k \prod_{j=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_j) = 1 - \prod_{j=1}^M (1 - \varepsilon_j) \quad (144)$$

において,  $M \rightarrow \infty$  としたとき,  $d=1$  という矛盾に至る。ゆえに, 背理法によって  $d=1$  とならざるを得ない。

そこで

$$\lambda_j = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \chi_k(j) \quad (145)$$

を使うと,

$$\gamma = \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j \gamma_{u_j} = \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} c_k \chi_k(j) \gamma_{u_j} = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \sum_{j=1}^{\infty} \chi_k(j) \gamma_{u_j} \quad (146)$$

と表すことができ,

$$\sum_{k=1}^{\infty} c_k = d = 1 \quad (147)$$

および

$$\sum_{j=1}^{\infty} \chi_k(j) \gamma_{u_j} \quad (148)$$

は階数  $N$  の作用素であるから,  $\gamma$  は凸結合として表示されていることがわかる。つまり,

$$(\gamma\phi)(z) = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \sum_{j=1}^{\infty} \chi_k(j) (u_j, \phi) u_j(z) \quad (149)$$

と書ける。

$$\pi: \{1, \dots, N\} \rightarrow \mathbb{N} \quad (150)$$

を使って

$$\phi_{\pi}(z) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \{u_{\pi(i)}(z_j)\}_{i,j=1}^N \quad (151)$$

と置くと,  $\Gamma = \Gamma_{\phi_{\pi}}$  すなわち

$$(\Gamma_{\phi_{\pi}}\phi)(z) = (\phi_{\pi}, \phi) \phi_{\pi}(z) \quad (152)$$

が求める密度行列である。

これまでの議論は逐次法が無限に続く場合を念頭に置いていた。逐次法が有限の回数で終了する場合は,

$$\varepsilon_{M+1} = \min \{ \tilde{f}_N^{(M)}, 1 - \tilde{f}_{N+1}^{(M)} \} = 1 \quad (153)$$

から  $\tilde{f}_N^{(M)} = 1$  および  $\tilde{f}_{N+1}^{(M)} = 0$  を満たす場合に限られ,

$$\tilde{f}_j^{(M)} = \chi_{[1, N]}(j) \quad (154)$$

となる。

$$\begin{aligned}
 f_{\sigma_{M-1}\sigma_{M-2}\cdots\sigma_1}^{(M)}(j) &= \tilde{f}_{\sigma_M\sigma_{M-1}\sigma_{M-2}\cdots\sigma_1}^{(M)}(j) \\
 &= \chi_{[1, N]}(\sigma_M\sigma_{M-1}\sigma_{M-2}\cdots\sigma_1(j)) = \chi_M(j)
 \end{aligned}
 \tag{155}$$

と置いて

$$\begin{aligned}
 \lambda_j &= \sum_{k=1}^M \varepsilon_k \prod_{j=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_j) \chi_k(j) + f_{\sigma_{M-1}\sigma_{M-2}\cdots\sigma_1}^{(M)}(j) \prod_{j=1}^M (1 - \varepsilon_j) \\
 &= \sum_{k=1}^{M+1} \varepsilon_k \prod_{j=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_j) \chi_k(j)
 \end{aligned}
 \tag{156}$$

となることから、同様に Slater の行列式を使って  $\Gamma$  を構成すればよいことがわかる。  $\square$

## 4 具 体 例

前節で述べた Coleman の定理に対する証明は、固有値が有限列の場合に限らず、無限列であっても成立することが数学的に厳密に議論された。ここでは、証明における一般的・抽象的な議論では見落とされがちな計算について、具体例を取り上げて概観する。

### 4.1 有限列の場合

$N = 2$  の有限列の具体例として、次のものを取り上げる：

$$\lambda = \left\{ 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{6}, 0, \dots \right\} \in \tilde{\mathcal{F}}_2
 \tag{157}$$

$\lambda_N = 1/2$ ,  $\lambda_{N+1} = 1/3$  であるから

$$\varepsilon_1 = \min \left\{ \frac{1}{2}, 1 - \frac{1}{3} \right\} = \frac{1}{2}
 \tag{158}$$

となる。変換  $T_{\varepsilon_1}$  に対して

$$f^{(1)} = \left\{ 1, \frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0, 0, \dots \right\} \in \mathcal{F}_2 \quad (159)$$

を得るが,

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 3 & 4 & 2 \end{pmatrix} \quad (160)$$

と置いて

$$\tilde{f}_j^{(1)} = f_{\sigma_1(j)}^{(1)} \quad (161)$$

のように定めると,  $\tilde{f}^{(1)} \in \tilde{\mathcal{F}}_2$  とすることができる。

次に

$$\varepsilon_2 = \min \left\{ \frac{1}{3}, 1 - \frac{1}{3} \right\} = \frac{1}{3} \quad (162)$$

から変換  $T_{\varepsilon_2}$  に対して

$$f^{(2)} = \{1, 1, 0, 0, \dots\} \in \mathcal{F}_2 \quad (163)$$

を得るが,

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 3 & 2 & 4 \end{pmatrix} \quad (164)$$

と置いて

$$\tilde{f}_j^{(2)} = f_{\sigma_2(j)}^{(1)} \quad (165)$$

のように定めると,  $\tilde{f}^{(2)} \in \tilde{\mathcal{F}}_N$  とすることができる。

ところが, 最後に  $\varepsilon_3 = 1$  となって, 逐次操作は終了する。このように, 有限列に変換  $T$  を施すと,  $N$  番目の要素が 0 になるか  $N+1$  番目の要素が 1 になるかのいずれかであるため, 有限回の手順によって  $\{1, \dots, 1, 0, \dots\} \in \tilde{\mathcal{F}}_N$  の形に落ち着くことがわかる。

ここで、上記の例における

$$c_k = \varepsilon_k \prod_{i=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_i) \quad (166)$$

によって定義される  $c = (c_1, c_2, c_3, c_4)$  を求めてみると、

$$c = \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{6}, 0 \right) \quad (167)$$

となることがわかる。 $\chi_k = \chi s_k$  と置くと、

$$S_1 = \{1, 2\} \quad (168)$$

$$S_2 = \{\sigma_1(1), \sigma_1(2)\} = \{1, 3\} \quad (169)$$

$$S_3 = \{\sigma_2\sigma_1(1), \sigma_2\sigma_1(2)\} = \{\sigma_2(1), \sigma_2(4)\} = \{1, 4\} \quad (170)$$

であることに注意して、

$$\lambda_j = \sum_{k=1}^3 c_k \chi_k(j), \quad j = 1, 2, 3, 4 \quad (171)$$

について計算すると、

$$\lambda_1 = \sum_{k=1}^3 c_k \chi_k(1) = \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{6} = 1 \quad (172)$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{2} \quad (173)$$

$$\lambda_3 = \frac{1}{3} \quad (174)$$

$$\lambda_4 = \frac{1}{6} \quad (175)$$

と固有値が復元されることが確認できた。

## 4.2 無限列の場合

一般の  $N$  の場合の具体例として、

$$\lambda = \left\{ 1, \dots, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2^2}, \frac{1}{2^3}, \dots \right\} \in \tilde{\mathcal{F}}_N \quad (176)$$

すなわち

$$\lambda_j = \begin{cases} 1 & (j = 1, \dots, N-1) \\ \frac{1}{2^{j-N+1}} & (j = N, N+1, \dots) \end{cases} \quad (177)$$

を取り上げる。 $\lambda_N = 1/2$ ,  $\lambda_{N+1} = 1/4$  であるから

$$\varepsilon_1 = \min \left\{ \frac{1}{2}, 1 - \frac{1}{4} \right\} = \frac{1}{2} \quad (178)$$

となる。変換  $T_1 = T_{\varepsilon_1}$  に対して

$$T_1: \lambda \mapsto f^{(1)} = \left\{ 1, \dots, 1, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2^2}, \dots \right\} \in \mathcal{F}_N \quad (179)$$

を得るが, 置換  $\tau_1: \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N} \setminus \{N\}$  を

$$\tau = \begin{pmatrix} 1 & \dots & N-1 & N & N+1 & \dots \\ 1 & \dots & N-1 & N+1 & N+2 & \dots \end{pmatrix} \quad (180)$$

と定めると

$$\tau: f^{(1)} \mapsto \tilde{f}^{(1)} = \left\{ 1, \dots, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2^2}, \frac{1}{2^3}, \dots \right\} \in \tilde{\mathcal{F}}_N \quad (181)$$

とすることができる。なお, 逆置換  $\sigma = \tau^{-1}$  を

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & \dots & N-1 & N+1 & N+2 & \dots \\ 1 & \dots & N-1 & N & N+1 & \dots \end{pmatrix} \quad (182)$$

とすれば,

$$f_j^{(1)} = \begin{cases} \tilde{f}_{\sigma(j)}^{(1)} & (j \neq N) \\ 0 & (j = N) \end{cases} \quad (183)$$

と一対一に対応する。 $j = N$  のときは

$$\lambda_j = \varepsilon_1 \chi_{[1, N]}(N) = \varepsilon_1 = \frac{1}{2} \quad (184)$$

と容易に復元できるため,  $j \neq N$  の場合について考えると

$$\begin{aligned} \lambda_j &= \varepsilon_1 \chi_{[1, N]}(j) + (1 - \varepsilon_j) \tilde{f}_{\sigma_1(j)}^{(1)} \\ &= \varepsilon_1 \chi_1(j) + (1 - \varepsilon_1) \{ \varepsilon_2 \chi_{[1, N]}(\sigma_1(j)) + (1 - \varepsilon_2) \tilde{f}_{\sigma(j)}^{(2)} \} \\ &= \varepsilon_1 \chi_1(j) + (1 - \varepsilon_1) \{ \varepsilon_2 \chi_2(j) + (1 - \varepsilon_2) \tilde{f}_{\sigma(j)}^{(2)} \} \\ &= \sum_{k=1}^2 \varepsilon_k \prod_{i=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_i) \chi_k(j) + \tilde{f}_{\sigma(j)}^{(2)} \prod_{i=1}^2 (1 - \varepsilon_i) \end{aligned} \quad (185)$$

したがって, 図式

$$\begin{array}{ccccc} \tilde{\mathcal{F}} & \xrightarrow{T_{\varepsilon_2}} & \mathcal{F} & \xrightarrow{\tau_2} & \tilde{\mathcal{F}} \\ \Downarrow & & \Downarrow & & \Downarrow \\ \tilde{f}^{(1)} & \mapsto & f^{(2)} & \mapsto & \tilde{f}^{(2)} \end{array} \quad (186)$$

において

$$\tilde{f}_j^{(2)} = f_{\tau(j)}^{(2)} \quad (187)$$

および

$$f_j^{(2)} = \begin{cases} \tilde{f}_{\sigma(j)}^{(2)} & (j \neq N) \\ 0 & (j = N) \end{cases} \quad (188)$$

によって与えられているが, この例の場合は

$$f_{\sigma(j)}^{(2)} = \tilde{f}_{\sigma^2(j)}^{(2)} \quad (189)$$

が成り立っている。

$j = N+1$  のとき

$$\chi_2(N+1) = \chi_{[1, N]}(\sigma(N+1)) = \chi_{[1, N]}(N) = 1 \quad (190)$$

だから

$$\lambda_{N+1} = \sum_{k=1}^2 \varepsilon_k \prod_{i=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_i) \chi_k(j) = \frac{1}{2^2} \quad (191)$$

が成り立ち,  $j \neq N, N+1$  のとき

$$\lambda_{N+1} = \sum_{k=1}^3 \varepsilon_k \prod_{i=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_i) \chi_k(j) + \tilde{f}_{\sigma^2(j)}^{(3)} \prod_{i=1}^3 (1 - \varepsilon_i) \quad (192)$$

が成り立っている。

以上の操作を繰り返すと, 一般の  $M$  に対して

$$\begin{aligned} f^{(\tilde{M}-1)} &= \left\{ 1, \dots, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2^2}, \frac{1}{2^3}, \dots \right\} \in \tilde{\mathcal{F}}_N \\ \Downarrow T_{\varepsilon M} &= T_\varepsilon \\ f^{(M-1)} &= \left\{ 1, \dots, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2^2}, \frac{1}{2^3}, \dots \right\} \in \mathcal{F}_N \\ \Downarrow \tau_M &= \tau \\ f^{(\tilde{M})} &= \left\{ 1, \dots, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2^2}, \frac{1}{2^3}, \dots \right\} \in \tilde{\mathcal{F}}_N \end{aligned} \quad (193)$$

において

$$\tilde{f}_j^{(M)} = f_{\tau(j)}^{(M)} \quad (194)$$

および

$$f_j^{(M)} = \begin{cases} \tilde{f}_{\sigma(j)}^{(M)} & (j \neq N) \\ 0 & (j = N) \end{cases} \quad (195)$$

によって与えられているが, この例の場合は

$$f_{\sigma^{M-1}(j)}^{(M)} = \tilde{f}_{\sigma^M(j)}^{(M)}, \quad i \notin \{N, N+1, \dots, N+M-1\} \quad (196)$$

が成り立っている。



$j = N + M - 1$  のとき

$$\chi_M(N + M - 1) = \chi_{[1, N]}(\sigma^{M-1}(N + M - 1)) = \chi_{[1, N]}(N) = 1 \quad (197)$$

だから

$$\lambda_{N+M-1} = \sum_{k=1}^M \varepsilon_k \prod_{i=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_i) \chi_k(j) = \frac{1}{2^M} \quad (198)$$

が成り立ち、 $j \neq N, N+1, \dots, N+M-1$  のとき

$$\begin{aligned} \lambda_j &= \sum_{k=1}^M \varepsilon_k \prod_{i=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_i) \chi_k(j) + \tilde{f}_{\sigma^{M-1}(j)}^{(M)} \prod_{i=1}^M (1 - \varepsilon_i) \\ &= \sum_{k=1}^{M+1} \varepsilon_k \prod_{i=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_i) \chi_k(j) + \tilde{f}_{\sigma^M(j)}^{(M+1)} \prod_{i=1}^{M+1} (1 - \varepsilon_i) \end{aligned} \quad (199)$$

が成り立っている。

すると、 $\varepsilon_i = \varepsilon = 1/2$  に注意して

$$c_k = \varepsilon_k \prod_{i=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_i) = \frac{1}{2^k} \quad (200)$$

となることから

$$\sum_{k=1}^{\infty} c_k = 1 \quad (201)$$

が成り立つと容易にわかる。よって、 $j \in \{1, \dots, N-1\}$  のとき

$$\sigma^{k-1}(j) = j \Rightarrow \chi_k(j) = 1, \lambda_j = 1 \quad (202)$$

$j = N + k - 1$  のとき

$$\sigma^{k-1}(N + k - 1) = N \Rightarrow \chi_k(j) = 1 \quad (203)$$

$j > N + k - 1$  のとき

$$\sigma^{k-1}(j) = N(j - N - k + 1) > N \Rightarrow \chi_k(j) = 0 \quad (204)$$

と場合分けすることができ、除外集合となる  $j \in \{N, N+1, \dots, N+k-2\}$  に対して  $\chi_k(j) = 0$  と約束することにすれば、無限列に対して問題なく操作できることが見て取れる。

## 5 今後の展望と課題

与えられた 1 次の縮約密度行列  $\gamma$  に対し、縮約操作によって  $\gamma$  となる  $N$  粒子系の密度行列  $\Gamma$  が存在する条件は、Fermi 統計に従う粒子の場合、占有数に関する Pauli の排他原理  $0 \leq \lambda_j \leq 1$  for  $j = 1, 2, \dots$  となることが知られている。このような研究は 1960～70 年代にかけて、多くの成果 [10, 18, 4, 7, 15, 2] によって解明されていった。最近では、Slater の行列式や Hilbert 空間における凸性などの性質を用いた議論によって、より詳しい結果 [9, 1] が出ている。また、量子多体系のエネルギーについて縮約密度行列によって求めようとする結果 [5, 6, 8] も増えてきた。さらに、量子情報の基礎理論 [13, 3] に関する議論が高まりを見せるにつれて、本研究テーマの実用性が認識され始めている。

縮約密度行列  $\gamma$  の固有値  $1 \geq \lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_R > 0 (R \geq N = 3)$  について考えよう。

$$\gamma u_j = \lambda_j u_j \quad \text{on } L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^q) \quad \text{for } j = 1, \dots, R \quad (205)$$

いま  $R = 3$  と仮定すると、 $\gamma$  に対応する純粋状態の密度行列  $\Gamma$  が存在するための必要十分条件は

$$\lambda_1 = 1, \quad \lambda_2 = 1, \quad \lambda_3 = 1 \quad (206)$$

である。実際、 $\{u_1, u_2, u_3\}$  を使って構成できる Slater の行列式を使えばよい。では  $R = 6$  のとき、 $\gamma$  に対応する純粋状態の密度行列  $\Gamma$  が存在するための必要十分条件は

$$\lambda_1 + \lambda_6 = 1, \quad \lambda_2 + \lambda_5 = 1, \quad \lambda_3 + \lambda_4 = 1 \quad (207)$$

および

$$\lambda_4 \leq \lambda_5 + \lambda_6. \quad (208)$$

である。この条件 [2, 16] と（和算にも取り上げられることのある）Soddy の 6 球連鎖の問題 [17, 14] の類似性から、何らかの有用な情報を引き出すなど幾何学的な構造に着目して問題の一般化を図ることは今後の課題である。

## 6 ま と め

本稿では Lieb-Seiringer [12] に沿って Coleman の定理 [4] における占有数条件の十分性について検討した。特に、これまで得られていた証明では数学的に厳密であるとは言い難かったところ、Lieb-Seiringer による証明のうち

Let us reorder the sequence  $R_j^{(M)}/(1 - \sum_{k=1}^M c_k)$  in decreasing order and call the resulting sequence  $r_j^{(M)}$ . Since  $0 \leq r_j^{(M)} \leq 1$  and  $\sum_j r_j^{(M)} = N$ , we conclude that  $r_{N+1}^{(M)} \leq N/(N+1)$ , as we noted earlier. Then  $1 - r_{N+1}^{(M)} \geq 1/(N+1)$ , which implies that  $\varepsilon_k$  can only go to zero if  $r_N^{(M)}$  goes to zero. But  $r_j^{(M)}$  converges, as  $M \rightarrow \infty$ , to  $r_j$ , which equals the sequence  $R_j/(1-d)$  rearranged in decreasing order. The numbers  $r_j$  are ordered, lie between 0 and 1, and sum to  $N$ . Hence  $r_N > 0$ . This implies that  $\lim_{k \rightarrow \infty} \varepsilon_k > 0$ .

Lieb and Seiringer (2010), p. 48

の部分で述べられた論理展開が無数個の固有値である場合にも正しいことが除外集合を含む慎重な議論によって確認できた。

## 参 考 文 献

- [1] M. Altunbulak and A. Klyachko, “The Pauli principle revisited,” Commun. Math. Phys. 282, pp. 287-322 (2008).
- [2] R. E. Borland and K. Dennis, “The conditions on the one-matrix for three-body fermion wavefunctions with one-rank equal to six,” J. Phys. B 5, pp. 7-15 (1972).

- [3] J. Chen, Z. Ji, M. B. Ruskai, B. Zeng, and D. -L. Zhou, “Comment on some results of Erdahl and the convex structure of reduced density matrices,” J. Math. Phys. 53(7), 072203 (2012).
- [4] A. J. Coleman, “Structure of fermion density matrices,” Rev. Mod. Phys. 35, pp. 668-686 (1963).
- [5] R. L. Frank, E. H. Lieb, R. Seiringer and H. Siedentop, “Müller’s exchange-correlation energy in density-matrix-functional theory,” Phys. Rev. A, 76 (2007), 052517.
- [6] R. L. Frank, P. T. Nam, and H. Van Den Bosch, “The maximal excess charge in Müller density-matrix-functional theory,” preprint arXiv : 1608.05625 (2016).
- [7] C. Garrod and J. K. Percus, “Reduction of the  $N$ -particle variational problem,” J. Math. Phys. 5, pp. 1756-1776 (1964).
- [8] C. Khele, “The maximal excess charge for a family of density-matrix-functional theories including Hartree-Fock and Müller theories,” Journal of Mathematical Physics 58, 011901 (2017).
- [9] A. Klyachko, “Quantum marginal problem and  $N$ -representability,” J. Phys. : Conf. Ser. 36, pp. 72-86 (2006).
- [10] H. Kuhn, “Linear inequalities and the Pauli principle,” Combinatorial Analysis, Proc. Symp. Appl. Math. 10, pp. 141-147 (1960).
- [11] E. H. Lieb and M. Loss, *Analysis*, American Mathematical Society, Providence (2001).
- [12] E. H. Lieb and R. Seiringer, *The Stability of Matter in Quantum Mechanics*, Cambridge (2010).
- [13] Y. -K. Liu, M. Christandl, and F. Verstraete, “Quantum computational complexity of the  $N$ -representability problem : QMA complete,” Phys. Rev. Lett. 98 (11), 110503 (2007).
- [14] T. Rothman, “Japanese Temple Geometry,” Sci. Amer. 278, pp. 85-91. May (1998).
- [15] M. B. Ruskai, “ $N$ -representability problem : particle-hole equivalence,” J. Math. Phys. 11 (11), pp. 3218-3224 (1970).
- [16] M. B. Ruskai, “Connecting  $N$ -representability to Weyl’s problem : the one-particle density matrix for  $N=3$  and  $R=6$ ,” J. Phys. A 40, pp. F961-F967 (2007).
- [17] F. Soddy, “The bowl of integers and the hexlet,” Nature 139, pp. 77-79 (1937). “The hexlet,” Nature 139, pp. 154 and pp. 251-252 (1937).
- [18] C. N. Yang, “Concept of off-diagonal long-range order and the quantum phases of liquid He and of superconductors,” Rev. Mod. Phys. 34, pp. 694-704 (1962).
- [19] S. Watanabe, “Über die Anwendung thermodynamischer Begriffe auf den Normalzustand des Atomkerns,” Zeitschrift für Physik, July 1939, Volume 113, Issue 7, pp. 482-513 (1939).
- [20] 檀裕也「シュレーディンガー方程式の数理構造」松山大学論集, 第 22 卷, 第 1 号, pp. 105-134 (2010).
- [21] 檀裕也「数理的アプローチによる量子複雑系の解析」松山大学論集, 第 25 卷, 第 3 号, pp. 67-98 (2013).