§15 同種粒子

[1] 次の Hamiltonian で記述される 2 粒子系を考える。

$$\hat{H} = \hat{h}_1 + \hat{h}_2 \,, \qquad \hat{h}_j \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_j^2 + U(\mathbf{r}_j)\,.$$

(a) $\hat{P}_{12}$ を座標 1 と座標 2 の置換演算子とする。$\hat{P}_{12}$ と $\hat{H}$ が可換であることを示せ。

(b) $\hat{P}_{12}$ の固有値を σ とする。σ の可能な値をすべてあげよ。

(c) 粒子のスピンと固有値 σ との関係、および Fermi 粒子・Bose 粒子の区別について、簡潔に説明せよ。

(d) フェルミ粒子系における Pauli 原理について簡潔に説明せよ。

(e) スピン s が $\frac{1}{2}$ の基底関数は、z 軸を量子化軸にとるとき、$|\uparrow\rangle \equiv |s_z = \frac{1}{2}\rangle$ および $|\downarrow\rangle \equiv |s_z = -\frac{1}{2}\rangle$ で与えられる。また、スピン s が $\frac{1}{2}$ の粒子が 2 個あるときの全スピン演算子は、$\hat{\mathbf{s}} \equiv \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$ である。$\hat{\mathbf{s}}^2$ と $\hat{s}_z$ のすべての同時固有状態を $|\alpha\rangle_1|\alpha'\rangle_2$ から構成せよ ($\alpha, \alpha' = \uparrow, \downarrow$)。

(f) $\hat{h}$ の二つの軌道固有関数を $\varphi_n(\mathbf{r})$ および $\varphi_{n'}(\mathbf{r})$ $(n \neq n')$ とする。この二つの軌道固有関数と (e) のスピン固有関数から、正しい置換対称性を持つ $\hat{H}$ の固有関数を構成せよ。

(g) (f) の問題で $n = n'$ の場合について、この軌道固有関数と (e) のスピン固有関数から、正しい置換対称性を持つ $\hat{H}$ の固有関数を構成せよ。

[2] ハミルトニアン

$$\hat{h} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

の固有状態 $\varphi_1(\mathbf{r})$ と $\varphi_2(\mathbf{r})$ で記述される 2 電子系を考察する。$\varphi_1(\mathbf{r})$ と $\varphi_2(\mathbf{r})$ の固有値をそれぞれ ε_1 および ε_2 として以下の問いに答えよ。

(a) 全スピン演算子は、$\hat{\mathbf{s}} \equiv \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$ である。$\hat{\mathbf{s}}^2$ と $\hat{s}_z$ のすべての同時固有状態を $|\alpha\rangle_1|\alpha'\rangle_2$ から構成せよ ($\alpha, \alpha' = \uparrow, \downarrow$)。

(b) $\varphi_1(\mathbf{r})$ と $\varphi_2(\mathbf{r})$、および (a) のスピン固有関数から、正しい置換対称性を持つ 2 電子系の波動関数 $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|s, s_z\rangle$ を構成せよ。

(c) (b) の波動関数が $\hat{H} \equiv \hat{h}_1 + \hat{h}_2$ の固有関数になっていることを示し、その固有値を求めよ。

(d) $\hat{H}$ の他に、2 電子間に相互作用 $\hat{H}' \equiv U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ が働く場合を考える。$\hat{H}'$ を最低次の摂動論で扱い、(c) の固有状態のエネルギー変化を計算せよ。

(e) (d) の摂動の効果が、次の演算子 $\hat{H}_{\rm ex}$ と等価であることを示せ。

$$\hat{H}_{\rm ex} \equiv A - \frac{J}{2}(1 + 4\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2),$$
$$A \equiv \int \mathrm{d}^3 r_1 \int \mathrm{d}^3 r_2 U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)|\varphi_1(\mathbf{r}_1)|^2|\varphi_2(\mathbf{r}_2)|^2 \quad \text{：クーロン積分},$$
$$J \equiv \int \mathrm{d}^3 r_1 \int \mathrm{d}^3 r_2 U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)\varphi_1^*(\mathbf{r}_1)\varphi_2^*(\mathbf{r}_2)\varphi_1(\mathbf{r}_2)\varphi_2(\mathbf{r}_1) \quad \text{：交換積分}.$$

注：$\hat{H}_{\rm ex}$ のスピンに依存する部分を Heisenberg の交換相互作用と呼ぶ。

[3] 場の演算子 $\hat{\psi}(x)$ と $\hat{\psi}^\dagger(x)$ が次の交換関係を満足するものとする。

$$[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(x')]_\sigma \equiv \hat{\psi}(x)\hat{\psi}^\dagger(x') - \sigma\hat{\psi}^\dagger(x')\hat{\psi}(x) = \delta(x - x'), \tag{1a}$$

$$[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(x')]_\sigma = [\hat{\psi}^\dagger(x), \hat{\psi}^\dagger(x')]_\sigma = 0, \tag{1b}$$

ここで、$x \equiv (\mathbf{r}\alpha)$ は空間座標 $\mathbf{r}$ とスピン座標 α を表し、また、$\sigma \equiv \pm 1$ および $\delta(x - x') \equiv \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta_{\alpha\alpha'}$ である。この演算子が以下の等式を満たすことを示せ。

$$\begin{aligned}
&\hat{\psi}(x_1')\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)\cdots\hat{\psi}^\dagger(x_N) \\
&= \delta(x_1', x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)\cdots\hat{\psi}^\dagger(x_N) + \sigma\delta(x_1', x_2)\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_3)\cdots\hat{\psi}^\dagger(x_N) + \cdots \\
&\quad + \sigma^{N-1}\delta(x_1', x_N)\hat{\psi}^\dagger(x_1)\cdots\hat{\psi}^\dagger(x_{N-1}) + \sigma^N\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)\cdots\hat{\psi}^\dagger(x_N)\hat{\psi}(x_1').
\end{aligned}$$

[4] (1) 式の交換関係を満たす場の演算子 $\hat{\psi}(x)$ と $\hat{\psi}^\dagger(x)$ を用いて、ブラケット・ベクトル $|0\rangle$ と $\langle 0|$ を、次の関係を満たす状態ベクトルとして導入する。

$$\hat{\psi}(x)|0\rangle = 0\,, \qquad 0 = (\hat{\psi}(x)|0\rangle)^* = \langle 0|\hat{\psi}^\dagger(x)\,, \qquad \langle 0|0\rangle = 1\,. \tag{2}$$

さらに、上記のブラケット・ベクトルを用いて、状態ベクトル $|x_1 x_2 \cdots x_N\rangle$ と $\langle x_1 x_2 \cdots x_N|$ を次式で定義する。

$$|x_1 x_2 \cdots x_N\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)\cdots\hat{\psi}^\dagger(x_N)|0\rangle\,, \tag{3a}$$

$$\langle x_1 x_2 \cdots x_N| \equiv |x_1 x_2 \cdots x_N\rangle^* = \frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|\hat{\psi}(x_N)\cdots\hat{\psi}(x_2)\hat{\psi}(x_1)\,. \tag{3b}$$

これらの状態ベクトルは、次の規格直交関係を満たす。

$$\langle x_1' x_2' \cdots x_M'|x_1 x_2 \cdots x_N\rangle = \frac{\delta_{MN}}{N!}\sum_P \sigma^P \delta(x_1', x_{p_1})\delta(x_2', x_{p_2})\cdots\delta(x_N', x_{p_N}). \tag{4}$$

(4) 式を $(M, N) = (3, 3)$ と $(2, 3)$ の場合に確かめよ。ただし σ^P は次式で定義されている。

$$\begin{cases} \sigma^P \equiv 1 & \text{：偶置換} \\ \sigma^P \equiv \sigma & \text{：奇置換} \end{cases}. \tag{5}$$

[5] (3) 式の状態ベクトル $|x_1 x_2 \cdots x_N\rangle$ は、置換

$$\hat{P} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & N \\ p_1 & p_2 & p_3 & \cdots & p_N \end{pmatrix}$$

の固有状態であり、

$$\hat{P}|x_1 x_2 \cdots x_N\rangle = \sigma^P |x_1 x_2 \cdots x_N\rangle \tag{6}$$

を満たす。$N=3$ で $\hat{P}$ が次式で与えられる場合について、このことを例証せよ。

$$\hat{P} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

[6] (3) 式の状態ベクトル $|x_1 x_2 \cdots x_N\rangle$ と、

$$\hat{P}\Psi(x_1, x_2, \cdots, x_N) = \sigma^P \Psi(x_1, x_2, \cdots, x_N) \tag{7}$$

を満たす波動関数 $\Psi(x_1, x_2, \cdots, x_N)$ を用いて、状態ベクトル $|\Psi\rangle$ を次式で定義する。

$$|\Psi\rangle \equiv \int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_2 \cdots \int \mathrm{d}x_N |x_1 x_2 \cdots x_N\rangle \Psi(x_1, x_2, \cdots, x_N). \tag{8}$$

この状態ベクトルが次式を満たすことを示せ。

$$\hat{\psi}(x_1)|\Psi\rangle = N \int \mathrm{d}x_2' \cdots \int \mathrm{d}x_N' |x_1 x_2' \cdots x_N'\rangle \Psi(x_1, x_2', \cdots, x_N'), \tag{9a}$$

$$\hat{\psi}(x_1)\hat{\psi}(x_2)|\Psi\rangle = N(N-1) \int \mathrm{d}x_3' \cdots \int \mathrm{d}x_N' |x_1 x_2 x_3' \cdots x_N'\rangle \Psi(x_1, x_2, x_3', \cdots, x_N'). \tag{9b}$$

[7] 同種多粒子系の 1 粒子演算子 $\hat{H}^{(1)}$ と 2 粒子演算子 $\hat{H}^{(2)}$ は、一般に次の形を持つ。

$$\hat{H}^{(1)} \equiv \sum_{j=1}^{N} \hat{h}_j^{(1)}, \qquad \hat{H}^{(2)} \equiv \sum_{i<j} \hat{h}_{ij}^{(2)}.$$

これらの演算子の $\Psi_{\nu'}^*(x_1, x_2, \cdots, x_N)$ と $\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N)$ の間の行列要素は、(8) 式の状態ベクトルを用いて以下のように表現できる。

$$\begin{aligned} &\int \mathrm{d}x_1 \cdots \int \mathrm{d}x_N \Psi_{\nu'}^*(x_1, \cdots, x_N) \hat{H}^{(1)} \Psi_\nu(x_1, \cdots, x_N) \\ &= \int \mathrm{d}x_1 \langle \Psi_{\nu'}|\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{h}_1^{(1)}\hat{\psi}(x_1)|\Psi_\nu\rangle, \end{aligned} \tag{10a}$$

$$\begin{aligned} &\int \mathrm{d}x_1 \cdots \int \mathrm{d}x_N \Psi_{\nu'}^*(x_1, \cdots, x_N) \hat{H}^{(2)} \Psi_\nu(x_1, \cdots, x_N) \\ &= \frac{1}{2} \int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_2 \langle \Psi_{\nu'}|\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)\hat{h}_{12}^{(2)}\hat{\psi}(x_2)\hat{\psi}(x_1)|\Psi_\nu\rangle. \end{aligned} \tag{10b}$$

(4), (6), (7), (9) 式を用いて (10) 式を証明せよ。

[8] 演算子 $\hat{c}$ と $\hat{c}^\dagger$ がボーズ粒子の交換関係

$$[\hat{c},\hat{c}^\dagger]_+ \equiv \hat{c}\hat{c}^\dagger - \hat{c}^\dagger\hat{c} = 1, \qquad [\hat{c},\hat{c}]_+ = [\hat{c}^\dagger,\hat{c}^\dagger]_+ = 0,$$

を満たすものとする。また状態 $|n\rangle$ $(n = 0, 1, 2, \cdots)$ を

$$\hat{c}|0\rangle = 0, \qquad |n\rangle \equiv \frac{(\hat{c}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle,$$

で定義する。

(a) $[\hat{c}, (\hat{c}^\dagger)^n] = n(\hat{c}^\dagger)^{n-1}$ を証明せよ。

(b) 演算子 $\hat{n} \equiv \hat{c}^\dagger\hat{c}$ を定義する。(a) の結果を用いて $\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$ を示せ。

[9] 演算子 $\hat{c}$ と $\hat{c}^\dagger$ がフェルミ粒子の交換関係

$$[\hat{c},\hat{c}^\dagger]_- \equiv \hat{c}\hat{c}^\dagger + \hat{c}^\dagger\hat{c} = 1, \qquad [\hat{c},\hat{c}]_- = [\hat{c}^\dagger,\hat{c}^\dagger]_- = 0,$$

を満たすものとする。また状態 $|n\rangle$ $(n = 0, 1, 2, \cdots)$ を

$$\hat{c}|0\rangle = 0, \qquad |n\rangle \equiv \frac{(\hat{c}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle,$$

で定義する。

(a) $(\hat{c}^\dagger)^2 = 0$ を証明せよ。

(b) $n \geq 2$ に対して $(\hat{c}^\dagger)^n = 0$ を証明せよ。

(c) (b) の結果より、状態 $|n\rangle$ は $n = 0, 1$ のみに対して有限であることがわかる。演算子 $\hat{n} \equiv \hat{c}^\dagger\hat{c}$ を定義する。$n = 0, 1$ に対して $\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$ を示せ。