§11 同種粒子

11.1 置換の基礎的事項

- **置換** $\hat{P}$ (permutation) —— 席 j にあったものを席 p_j に移す。

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

相異なる $\hat{P}$ の数は $N!$

- **巡回置換** $\hat{C}$ (cyclic permutation)

$$\hat{C} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & k-1 & k \\ 2 & 3 & 4 & \cdots & k & 1 \end{pmatrix} \equiv (1\,2\,3 \cdots k) \tag{2}$$

- **互換**

$$(1\,2) \equiv \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \tag{3}$$

置換に関連した数学的事実（証明は、浅野啓三、永尾汎著「群論」、岩波全書、1965 年、§4 参照）

(a) 任意の置換 —— 巡回置換の積に書くことができる

例 $\quad \hat{P} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 2 & 5 & 6 & 4 & 1 & 3 \end{pmatrix} = (4)\,(3\,6)\,(1\,2\,5) \equiv (3\,6)\,(1\,2\,5)$

(b) 巡回置換 —— 互換の積に書くことができる

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & k-2 & k-1 & k \\ 1 & 2 & \cdots & k-2 & k-1 & k \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & k-2 & k-1 & k \\ k & 2 & \cdots & k-2 & k-1 & 1 \end{pmatrix}$$
$$\to \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & k-2 & k-1 & k \\ k-1 & 2 & \cdots & k-2 & k & 1 \end{pmatrix} \to \cdots \to \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & k-2 & k-1 & k \\ 2 & 3 & \cdots & k-1 & k & 1 \end{pmatrix}$$
$$\therefore \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & k-2 & k-1 & k \\ 2 & 3 & \cdots & k-1 & k & 1 \end{pmatrix} = (1\,2)\,(1\,3) \cdots (1\,k-1)\,(1\,k) \tag{4}$$

(4) 式の右辺は右から順に恒等置換に作用

(c) (a) と (b) より、任意の置換 —— 互換の積に書くことができる

例 1： $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 2 & 5 & 6 & 4 & 1 & 3 \end{pmatrix} = (3\,6)\,(1\,2\,5) = (3\,6)\,(1\,2)\,(1\,5)$

例 2： $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 2 & 5 & 6 & 3 & 1 & 4 \end{pmatrix} = (3\,6\,4)\,(1\,2\,5) = (3\,6)\,(3\,4)\,(1\,2)(1\,5)$

(d) 各々の置換を互換の積で表したときの互換の数の偶奇は互換の仕方によらない

$$\text{互換の数が} \begin{cases} \text{偶数個の} \hat{P} & \text{：偶置換} \\ \text{奇数個の} \hat{P} & \text{：奇置換} \end{cases}$$

11.2 同種多粒子系と置換についての対称性

- **ハミルトニアン —— （自由粒子部分）＋（相互作用項）**

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_j^2 + U(\mathbf{r}_j)\right] + \sum_{i<j} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \equiv \sum_{j=1}^{N}\hat{h}_j^{(1)} + \sum_{i<j}\hat{h}_{ij}^{(2)} \tag{5}$$

- **固有関数**： $\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N)$ $\quad \begin{cases} \nu & \text{：多粒子系を指定する一組の量子数} \\ x \equiv \mathbf{r}\alpha & \text{：空間座標＋スピン座標 (スピン量子数)} \end{cases}$

- **$\hat{H}$ の置換についての対称性**

$\hat{P}_{ij} = (i\,j)$ ：i と j の入れ換えの演算子

(a) $\hat{P}_{ij}\hat{H}\hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{H}$ $\quad \because$ $\hat{H}$ は (i, j) についての和でできている

例：２粒子系

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \\ \hat{P}_{12}\hat{H}\hat{P}_{12}^{-1} &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_2^2 + \nabla_1^2) + V(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|)\right]\hat{P}_{12}\hat{P}_{12}^{-1} = \hat{H} \end{aligned}$$

故に、$\hat{H}$ と $\hat{P}_{ij}$ は同時対角化可能（定常状態では $\hat{P}_{ij}$ の固有状態は変化しない）

(b) $\hat{P}_{12}$ の固有値 σ

$$\begin{aligned} \hat{P}_{12}\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) &\equiv \Psi_\nu(x_2, x_1, \cdots, x_N) = \sigma\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) \\ \hat{P}_{12}^2\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) &= \Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) = \sigma^2\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) \end{aligned}$$

$$\therefore \quad \sigma^2 = 1 \quad \longleftrightarrow \quad \sigma = \pm 1$$

$$\sigma = \begin{cases} +1 & \text{：ボーズ粒子} \\ -1 & \text{：フェルミ粒子} \end{cases} \quad \longleftrightarrow \quad \text{スピンは} \begin{cases} \text{整数} \\ \text{半整数} \end{cases} \quad \text{（Pauli, 1940）}$$

例： 電子、陽子、中性子 — $s = \frac{1}{2}$ (フェルミ粒子)
光子 — $s = 1$ (ボーズ粒子)
水素原子 (陽子１＋電子１） — $s = 0, 1$ (ボーズ粒子)

(c) 任意の置換 $\hat{P} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & N \\ p_1 & p_2 & p_3 & \cdots & p_N \end{pmatrix}$ に対し、

$$\hat{P}\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) \equiv \Psi_\nu(x_{p_1}, x_{p_2}, \cdots, x_{p_N}) = \sigma^P\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N)\,. \tag{6}$$

ここで、σ^P は、次式で定義されている。

$$\begin{cases} \sigma^P \equiv 1 & \text{：偶置換} \\ \sigma^P \equiv \sigma & \text{：奇置換} \end{cases} . \tag{7}$$

11.3 調和振動子における演算子法の復習

- **生成消滅演算子 $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$**

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]_+ \equiv \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1\,, \tag{8a}$$

$$[\hat{a}, \hat{a}]_+ = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger]_+ = 0\,. \tag{8b}$$

- **固有状態 $|n\rangle$ $(n = 0, 1, 2, \cdots)$**

$$\hat{a}|0\rangle = 0\,, \qquad 0 = (\hat{a}|0\rangle)^\dagger = \langle 0|\hat{a}^\dagger\,, \tag{9a}$$

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle\,, \qquad \langle n'|n\rangle = \delta_{n'n}\,. \tag{9b}$$

11.4 第二量子化 — 対称化・反対称化された空間の構成

(1) 場の演算子 $\hat{\psi}_\alpha(\mathrm{r})$ と $\hat{\psi}^\dagger_\alpha(\mathrm{r})$ を次式で定義（数学）$\longleftarrow$ 11.3 の生成消滅演算子からの発想

$$[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger_{\alpha'}(\mathbf{r}')]_\sigma \equiv \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r})\hat{\psi}^\dagger_{\alpha'}(\mathbf{r}') - \sigma\hat{\psi}^\dagger_{\alpha'}(\mathbf{r}')\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) = \delta_{\alpha\alpha'}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{10a}$$

$$[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{\alpha'}(\mathbf{r}')]_\sigma = [\hat{\psi}^\dagger_\alpha(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger_{\alpha'}(\mathbf{r}')]_\sigma = 0 \tag{10b}$$

以下、$x \equiv (\mathbf{r}\alpha)$ を用いて通常の空間とスピン空間を x で一緒に記述する。すなわち、

$$\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) \longrightarrow \hat{\psi}(x)\,, \qquad \delta(x', x) \equiv \delta_{\alpha'\alpha}\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\,, \qquad \int dx \equiv \sum_\alpha \int d\mathbf{r}\,.$$

(2) (粒子のない) 状態 $|0\rangle$ と $\langle 0|$ を次式で定義

$$\hat{\psi}(x)|0\rangle = 0\,, \qquad 0 = (\hat{\psi}(x)|0\rangle)^\dagger = \langle 0|\hat{\psi}^\dagger(x)\,, \qquad \langle 0|0\rangle = 1\,. \tag{11}$$

(3) 状態 $|x_1 x_2 \cdots x_N\rangle$

$$|x_1 x_2 \cdots x_N\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)\cdots\hat{\psi}^\dagger(x_N)|0\rangle\,, \tag{12a}$$

$$\langle x_1 x_2 \cdots x_N| \equiv |x_1 x_2 \cdots x_N\rangle^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|\hat{\psi}(x_N)\cdots\hat{\psi}(x_2)\cdots\hat{\psi}(x_1)\,. \tag{12b}$$

$|x_1 x_2 \cdots x_N\rangle$ は、$\left\{\begin{array}{l}\text{対称化}\\ \text{反対称化}\end{array}\right.$ された座標空間になっている。例えば、

$$\begin{aligned}|x_2 x_1 x_3 \cdots x_N\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\psi}^\dagger(x_2)\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_3)\cdots\hat{\psi}^\dagger(x_N)|0\rangle \\ &\qquad\qquad \text{ここで } \hat{\psi}^\dagger(x_2)\hat{\psi}^\dagger(x_1) = \sigma\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2) \text{ を使う} \\ &= \sigma\frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)\hat{\psi}^\dagger(x_3)\cdots\hat{\psi}^\dagger(x_N)|0\rangle \\ &= \sigma|x_1 x_2 x_3 \cdots x_N\rangle\,.\end{aligned}$$

一般に

$$\hat{P}|x_1 x_2 \cdots x_N\rangle = |x_{p_1} x_{p_2} \cdots x_{p_N}\rangle = \sigma^P|x_1 x_2 \cdots x_N\rangle\,. \tag{13}$$

(4) 直交性

$$\langle x_1' x_2' \cdots x_M' | x_1 x_2 \cdots x_N \rangle = \frac{\delta_{MN}}{N!} \sum_P \sigma^P \delta(x_1', x_{p_1}) \delta(x_2', x_{p_2}) \cdots \delta(x_N', x_{p_N}) \tag{14}$$

証明

○ $N = M = 1$ の場合

$$\begin{aligned}
\langle x_1' | x_1 \rangle &= \langle 0 | \hat{\psi}(x_1') \hat{\psi}^\dagger(x_1) | 0 \rangle = \langle 0 | \delta(x_1', x_1) + \sigma \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{\psi}(x_1') | 0 \rangle \\
&= \delta(x_1', x_1) \langle 0 | 0 \rangle + \sigma \langle 0 | \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{\psi}(x_1') | 0 \rangle \\
&\qquad\qquad \text{ここで } \langle 0|0 \rangle = 1 \text{ および } \hat{\psi}(x_1')|0\rangle = 0 \text{ を使う} \\
&= \delta(x_1', x_1) \,.
\end{aligned}$$

○ $N = M = 2$ の場合

$$\begin{aligned}
&\langle x_1' x_2' | x_1 x_2 \rangle = \frac{1}{2!} \langle 0 | \hat{\psi}(x_2') \hat{\psi}(x_1') \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{\psi}^\dagger(x_2) | 0 \rangle \\
&\qquad\qquad \text{ここで } \hat{\psi}(x_1') \hat{\psi}^\dagger(x_1) = \delta(x_1', x_1) + \sigma \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{\psi}(x_1') \text{ を使う} \\
&= \frac{1}{2!} \langle 0 | \hat{\psi}(x_2') [\delta(x_1', x_1) + \sigma \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{\psi}(x_1')] \hat{\psi}^\dagger(x_2) | 0 \rangle \\
&= \frac{1}{2!} \left[\delta(x_1', x_1) \langle 0 | \hat{\psi}(x_2') \hat{\psi}^\dagger(x_2) | 0 \rangle + \sigma \langle 0 | \hat{\psi}(x_2') \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{\psi}(x_1') \hat{\psi}^\dagger(x_2) | 0 \rangle \right] \\
&\qquad\qquad \text{さらに } \hat{\psi}(x_1') \hat{\psi}^\dagger(x_2) = \delta(x_1', x_2) + \sigma \hat{\psi}^\dagger(x_2) \hat{\psi}(x_1') \text{ を使う} \\
&= \frac{1}{2!} \left[\delta(x_1', x_1) \delta(x_2', x_2) + \sigma \langle 0 | \hat{\psi}(x_2') \hat{\psi}^\dagger(x_1) [\delta(x_1', x_2) + \sigma \hat{\psi}^\dagger(x_2) \hat{\psi}(x_1')] | 0 \rangle \right] \\
&= \frac{1}{2!} \left[\delta(x_1', x_1) \delta(x_2', x_2) + \sigma \delta(x_1', x_2) \langle 0 | \hat{\psi}(x_2') \hat{\psi}^\dagger(x_1) | 0 \rangle \right. \\
&\qquad \left. + \sigma^2 \langle 0 | \hat{\psi}(x_2') \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{\psi}^\dagger(x_2) \hat{\psi}(x_1') | 0 \rangle \right] \\
&= \frac{1}{2!} \left[\delta(x_1', x_1) \delta(x_2', x_2) + \sigma \delta(x_1', x_2) \delta(x_2', x_1) \right] \,.
\end{aligned}$$

○ $M = 1$, $N = 2$ の場合

$$\begin{aligned}
\langle x_1' | x_1 x_2 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2!}} \langle 0 | \hat{\psi}(x_1') \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{\psi}^\dagger(x_2) | 0 \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2!}} \langle 0 | [\delta(x_1', x_1) + \sigma \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{\psi}(x_1')] \hat{\psi}^\dagger(x_2) | 0 \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2!}} \left[\delta(x_1', x_1) \langle 0 | \hat{\psi}^\dagger(x_2) | 0 \rangle + \sigma \langle 0 | \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{\psi}(x_1') \hat{\psi}^\dagger(x_2) | 0 \rangle \right] \\
&\qquad\qquad \text{ここで } \langle 0 | \hat{\psi}^\dagger(x) = 0 \text{ を使う} \\
&= 0 \,.
\end{aligned}$$

以下、同様に証明できる。一般的証明には、次式を使う。

$$\begin{aligned}
&\hat{\psi}(y_1) \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{\psi}^\dagger(x_2) \cdots \hat{\psi}^\dagger(x_N) \\
&= \delta(y_1, x_1) \hat{\psi}^\dagger(x_2) \cdots \hat{\psi}^\dagger(x_N) + \sigma \delta(y_1, x_2) \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{\psi}^\dagger(x_3) \cdots \hat{\psi}^\dagger(x_N) + \cdots \\
&\quad + \sigma^{N-1} \delta(y_1, x_N) \hat{\psi}^\dagger(x_1) \cdots \hat{\psi}^\dagger(x_{N-1}) + \sigma^N \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{\psi}^\dagger(x_2) \cdots \hat{\psi}^\dagger(x_N) \hat{\psi}(y_1) \,.
\end{aligned} \tag{15}$$

(5) $\begin{cases}\text{対称化}\\ \text{反対称化}\end{cases}$ された波動関数 $\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) \longrightarrow$ 状態ベクトル $|\Psi_\nu\rangle$ の構成

$$|\Psi_\nu\rangle \equiv \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \, |x_1 x_2 \cdots x_N\rangle \Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) \tag{16a}$$

$$\langle\Psi_\nu| \equiv |\Psi_\nu\rangle^\dagger = \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \, \langle x_1 x_2 \cdots x_N|\Psi^*_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) \tag{16b}$$

$|\Psi_\nu\rangle$ の性質

$$\hat\psi(y_1)|\Psi_\nu\rangle = \sqrt{N}\int dx_2 \cdots dx_N \, |x_2 \cdots x_N\rangle \Psi_\nu(y_1, x_2, \cdots, x_N)\,, \tag{17a}$$

$$\hat\psi(y_2)\hat\psi(y_1)|\Psi_\nu\rangle = \sqrt{N(N-1)}\int dx_3 \cdots dx_N \, |x_3 \cdots x_N\rangle \Psi_\nu(y_1, y_2, x_3, \cdots, x_N)\,, \tag{17b}$$

$$\hat\psi(y_N)\cdots\hat\psi(y_2)\hat\psi(y_1)|\Psi_\nu\rangle = |0\rangle\sqrt{N!}\,\Psi_\nu(y_1, y_2, \cdots, y_N)\,. \tag{17c}$$

最後の式から次式が得られる。

$$\langle y_1 y_2 \cdots y_N|\Psi_\nu\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|\hat\psi(y_N)\cdots\hat\psi(y_2)\hat\psi(y_1)|\Psi_\nu\rangle = \Psi_\nu(y_1, y_2, \cdots, y_N)\,. \tag{18}$$

この式を (16a) 式に代入すると、以下の等式が出てくる。

$$|\Psi_\nu\rangle \equiv \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \, |x_1 x_2 \cdots x_N\rangle\langle x_1 x_2 \cdots x_N|\Psi_\nu\rangle\,,$$

すなわち、

$$\int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \, |x_1 x_2 \cdots x_N\rangle\langle x_1 x_2 \cdots x_N| = 1\,. \tag{19}$$

言い換えると、$|x_1 x_2 \cdots x_N\rangle$ は、対称化・反対称化された空間の完全系を構成している。

<u>(17a) 式の証明</u>

$$\hat\psi(y_1)|\Psi_\nu\rangle = \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \, \frac{1}{\sqrt{N!}}\hat\psi(y_1)\hat\psi^\dagger(x_1)\hat\psi^\dagger(x_2)\cdots\hat\psi^\dagger(x_N)|0\rangle\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N)$$

上式で $\hat\psi(y_1)$ を $|0\rangle$ の隣まで移動させた後 $\hat\psi(y_1)|0\rangle = 0$ を使う

$$\begin{aligned}
&= \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \, \frac{1}{\sqrt{N!}}[\delta(y_1, x_1) + \sigma\hat\psi^\dagger(x_1)\hat\psi(y_1)]\hat\psi^\dagger(x_2)\cdots\hat\psi^\dagger(x_N)|0\rangle \\
&\qquad \times\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) \\
&= \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \, \frac{1}{\sqrt{N!}}\Big[\delta(y_1, x_1)\hat\psi^\dagger(x_2)\cdots\hat\psi^\dagger(x_N)|0\rangle\Psi_\nu(y_1, x_2, \cdots, x_N) \\
&\quad +\sigma\delta(y_1, x_2)\hat\psi^\dagger(x_1)\hat\psi^\dagger(x_3)\cdots\hat\psi^\dagger(x_N)|0\rangle\Psi_\nu(x_1, y_2, x_3, \cdots, x_N) + \cdots \\
&\quad +\sigma^{N-1}\delta(y_1, x_N)\hat\psi^\dagger(x_1)\cdots\hat\psi^\dagger(x_{N-1})|0\rangle\Psi_\nu(x_1, \cdots, x_{N-1}, y_1) \\
&\quad +\sigma^N\hat\psi^\dagger(x_1)\hat\psi^\dagger(x_2)\cdots\hat\psi^\dagger(x_N)\hat\psi(y_1)|0\rangle\Psi_\nu(x_1, \cdots, x_{N-1}, x_N)\Big]
\end{aligned}$$

$$\begin{cases}\Psi_\nu(x_1, y_2, x_3, \cdots, x_N) = \sigma\Psi_\nu(y_2, x_1, x_3, \cdots, x_N) \\ \Psi_\nu(x_1, \cdots, x_{N-1}, y_1) = \sigma^{N-1}\Psi_\nu(y_2, x_1, x_2, \cdots, x_{N-1})\end{cases} \quad \text{等を使う}$$

$$\begin{aligned}
&= \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \, \frac{1}{\sqrt{N!}}N\delta(y_1, x_1)\hat\psi^\dagger(x_2)\cdots\hat\psi^\dagger(x_N)|0\rangle\Psi_\nu(y_1, x_2, \cdots, x_N) \\
&= \sqrt{N}\int dx_2 \cdots dx_N \, \frac{1}{\sqrt{(N-1)!}}\hat\psi^\dagger(x_2)\cdots\hat\psi^\dagger(x_N)|0\rangle\Psi_\nu(y_1, x_2, \cdots, x_N)
\end{aligned}$$

(17b), (17c) 式も同様に証明できる。

(注) $\Psi'(x_1, \cdots, x_N)$: 未だ対称化・反対称化されていない波動関数

$$\Downarrow$$

$|\Psi'\rangle = \int dx_1 \cdots dx_N |x_1 \cdots x_N\rangle \Psi'(x_1, \cdots, x_N)$ により対称化・反対称化が実行済みとなる。

(6) $\{\Psi_\nu\}$ の規格直交性と完全性

$\{\Psi_\nu\}$ が規格直交性と完全性を持つとする。このことは次のように表せる。

$$\int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \Psi^*_{\nu'}(x_1, x_2, \cdots, x_N) \Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) dx = \delta_{\nu'\nu}\,, \tag{20a}$$

$$\sum_\nu \Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) \Psi^*_\nu(x'_1, x'_2, \cdots, x'_N) = \frac{1}{N!} \sum_P \sigma^P \delta(x'_1, x_{p_1}) \delta(x'_2, x_{p_2}) \cdots \delta(x'_N, x_{p_N})\,. \tag{20b}$$

この関係式を状態ベクトルで表すと、次のようになる。

$$\langle \Psi_{\nu'} | \Psi_\nu \rangle = \delta_{\nu'\nu}\,, \tag{21a}$$

$$\sum_\nu |\Psi_\nu\rangle\langle\Psi_\nu| = 1\,. \tag{21b}$$

<u>(21a) 式の証明</u>

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_{\nu'} | \Psi_\nu \rangle &= \int dx'_1 \cdots dx'_N \int dx_1 \cdots dx_N \Psi^*_{\nu'}(x'_1, \cdots, x'_N) \langle x'_1 \cdots x'_N | x_1 \cdots x_N \rangle \Psi_\nu(x_1, \cdots, x_N) \\
&= \int dx'_1 \cdots dx'_N \int dx_1 \cdots dx_N \Psi^*_{\nu'}(x'_1, \cdots, x'_N) \frac{1}{N!} \sum_P \sigma^P \delta(x'_1, x_{p_1}) \cdots \delta(x'_N, x_{p_N}) \\
&\qquad \times \Psi_\nu(x_1, \cdots, x_N) \\
&= \int dx_1 \cdots dx_N \frac{1}{N!} \sum_P \sigma^P \Psi^*_{\nu'}(x_{p_1}, \cdots, x_{p_N}) \Psi_\nu(x_1, \cdots, x_N) \\
&= \int dx_1 \cdots dx_N \Psi^*_{\nu'}(x_1, \cdots, x_N) \Psi_\nu(x_1, \cdots, x_N) = \delta_{\nu'\nu}
\end{aligned}$$

<u>(21b) 式の証明</u>

$$\begin{aligned}
\sum_\nu |\Psi_\nu\rangle\langle\Psi_\nu| &= \int dx'_1 \cdots dx'_N \int dx_1 \cdots dx_N |x_1 \cdots x_N\rangle \langle x'_1 \cdots x'_N| \\
&\qquad \times \sum_\nu \Psi_\nu(x_1, \cdots, x_N) \Psi^*_\nu(x'_1, \cdots, x'_N) \\
&= \int dx'_1 \cdots dx'_N \int dx_1 \cdots dx_N |x_1 \cdots x_N\rangle \langle x'_1 \cdots x'_N| \frac{1}{N!} \sum_P \sigma^P \delta(x'_1, x_{p_1}) \cdots \delta(x'_N, x_{p_N}) \\
&= \int dx_1 \cdots dx_N |x_1 \cdots x_N\rangle \frac{1}{N!} \sum_P \sigma^P \langle x_{p_1} \cdots x_{p_N}| \\
&= \int dx_1 \cdots dx_N |x_1 \cdots x_N\rangle \langle x_1 \cdots x_N| = 1\,.
\end{aligned} \tag{22}$$

ここで、(19) 式を用いた。

$$(7) \quad \begin{cases} \textbf{1粒子演算子}\hat{H}^{(1)} \equiv \sum_{j=1}^{N} \hat{h}_j^{(1)} \\ \textbf{2粒子演算子}\hat{H}^{(2)} \equiv \sum_{i<j} \hat{h}_{ij}^{(2)} \end{cases} \textbf{の行列要素の表式}$$

$$\int dx_1 \cdots dx_N \Psi^*_{\nu'}(x_1, \cdots, x_N) \hat{H}^{(1)} \Psi_\nu(x_1, \cdots, x_N) = \int dx_1 \langle \Psi_{\nu'} | \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{h}_1^{(1)} \hat{\psi}(x_1) | \Psi_\nu \rangle \,, \tag{23a}$$

$$\begin{aligned} &\int dx_1 \cdots dx_N \Psi^*_{\nu'}(x_1, \cdots, x_N) \hat{H}^{(2)} \Psi_\nu(x_1, \cdots, x_N) \\ &= \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 \langle \Psi_{\nu'} | \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{\psi}^\dagger(x_2) \hat{h}_{12}^{(2)} \hat{\psi}(x_2) \hat{\psi}(x_1) | \Psi_\nu \rangle \,. \end{aligned} \tag{23b}$$

(23a) 式の証明

$$\int dx_1 \langle \Psi_{\nu'} | \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{h}_1^{(1)} \hat{\psi}(x_1) | \Psi_\nu \rangle$$

$$\begin{cases} \hat{\psi}(x_1)|\Psi_\nu\rangle = \sqrt{N} \int dx_2 \cdots dx_N |x_2 \cdots x_N\rangle \Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) \\ \langle \Psi_{\nu'} | \hat{\psi}^\dagger(x_1) = \sqrt{N} \int dx'_2 \cdots dx'_N \langle x'_2 \cdots x'_N | \Psi^*_{\nu'}(x_1, x'_2, \cdots, x'_N) \\ \langle x'_2 \cdots x'_N | x_2 \cdots x_N \rangle = \dfrac{1}{(N-1)!} \sum_P \sigma^P \delta(x'_2, x_{p_2}) \cdots \delta(x'_N, x_{p_N}) \end{cases} \text{を使う}$$

$$= N \int dx_1 \int dx_2 \cdots dx_N \frac{1}{(N-1)!} \sum_P \sigma^P \Psi^*_{\nu'}(x_1, x_{p_2}, \cdots, x_{p_N}) \hat{h}_1^{(1)} \Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N)$$

$$\frac{1}{(N-1)!} \sum_P \sigma^P \Psi^*_{\nu'}(x_1, x_{p_2}, \cdots, x_{p_N}) = \Psi^*_{\nu'}(x_1, x_2, \cdots, x_N) \text{ を使う}$$

$$= N \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \Psi^*_{\nu'}(x_1, x_2, \cdots, x_N) \hat{h}_1^{(1)} \Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N)$$

$$\Psi_\nu(x_1, x_2, x_3, \cdots, x_N) = \sigma \Psi_\nu(x_2, x_1, x_3, \cdots, x_N) \text{ を使う}$$

$$= N \int dx_1 \cdots dx_N \Psi^*_{\nu'}(x_2, x_1, x_3, \cdots, x_N) \hat{h}_1^{(1)} \Psi_\nu(x_2, x_1, x_3, \cdots, x_N)$$

$$= \int dx_1 \cdots dx_N \Psi^*_{\nu'}(x_1, x_2, x_3, \cdots, x_N) \sum_{j=1}^{N} \hat{h}_j^{(1)} \Psi_\nu(x_1, x_2, x_3, \cdots, x_N)$$

(23b) 式も同様に証明できる。

- **まとめ — 多粒子系に関する次の二つの記述法は全く等価**

(a) **第一量子化法 — 通常の波動関数による記述**

ハミルトニアン

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_j^2 + U(\mathbf{r}_j) \right] + \sum_{i<j} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \equiv \sum_{j=1}^{N} \hat{h}_j^{(1)} + \sum_{i<j} \hat{h}_{ij}^{(2)}\,, \tag{24a}$$

対称化 (ボーズ粒子)・反対称化 (フェルミ粒子) された波動関数

$$\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N)\,. \tag{24b}$$

ハミルトニアンの行列要素 — 対角化すべき行列

$$H_{\nu'\nu} = \int dx_1 \cdots dx_N \Psi_{\nu'}^*(x_1, \cdots, x_N)\hat{H}\Psi_\nu(x_1, \cdots, x_N) \tag{24c}$$

(b) **第二量子化法 — 場の演算子による記述**

ハミルトニアン

$$\hat{H} = \int dx_1 \hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{h}_1^{(1)}\hat{\psi}(x_1) + \frac{1}{2}\int dx_1 \int dx_2 \hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)\hat{h}_{12}^{(2)}\hat{\psi}(x_2)\hat{\psi}(x_1)\,, \tag{25a}$$

状態ベクトル

$$|\Psi_\nu\rangle = \int dx_1 \cdots dx_N |x_1 \cdots x_N\rangle \Psi_\nu(x_1, \cdots, x_N)\,. \tag{25b}$$

ハミルトニアンの行列要素 — 対角化すべき行列

$$H_{\nu'\nu} = \langle \Psi_{\nu'}|\hat{H}|\Psi_\nu\rangle \tag{25c}$$

- **第二量子化ハミルトニアン — １粒子演算子 $\hat{h}^{(1)}$ の固有状態による表現**

１粒子 Schrödinger 方程式

$$\hat{h}_1^{(1)}\varphi_k(x_1) = \varepsilon_k \varphi_k(x_1)\,, \qquad \left\{ \begin{array}{ll} x = \mathbf{r}\alpha & :\text{空間座標＋スピン座標 (量子数)} \\ k & :\text{１粒子状態を指定する量子数の組} \end{array} \right. . \tag{26}$$

例： $\hat{h}_1^{(1)} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2$ および $s = \frac{1}{2}$ の場合、$k = (\mathbf{k}\alpha)$, $\alpha = \uparrow, \downarrow$.

１粒子固有関数 $\varphi_k(x) \equiv \langle x|k\rangle$ の完全規格直交性

$$\langle k'|k\rangle = \int dx \langle k'|x\rangle\langle x|k\rangle = \int dx\, \varphi_{k'}^*(x)\varphi_k(x) = \delta_{k'k} \qquad :\text{規格直交性} \tag{27a}$$

$$\sum_k \varphi_k(x)\varphi_k^*(x') = \delta(x, x') \quad \text{もしくは} \quad \sum_k |k\rangle\langle k| = 1 \qquad :\text{完全性} \tag{27b}$$

場の演算子 $\hat{\psi}(x)$ の $\varphi_k(x)$ による展開

$$\hat{\psi}(x) = \sum_k \hat{c}_k \varphi_k(x) \qquad \longleftrightarrow \qquad \hat{c}_k = \int \varphi_k^*(x)\hat{\psi}(x)\, dx \tag{28a}$$

$$\hat{\psi}^\dagger(x) = \sum_k \hat{c}_k^\dagger \varphi_k^*(x) \qquad \longleftrightarrow \qquad \hat{c}_k^\dagger = \int \hat{\psi}^\dagger(x)\varphi_k(x)\,dx \tag{28b}$$

交換関係

$$[\hat{c}_k, \hat{c}_{k'}^\dagger]_\sigma = \int dx \int dx' \varphi_k^*(x)[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(x')]_\sigma \varphi_{k'}(x') = \int dx\, \varphi_k^*(x)\varphi_{k'}(x) = \delta_{kk'}\,, \tag{29a}$$

同様にして

$$[\hat{c}_k, \hat{c}_{k'}]_\sigma = [\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_{k'}^\dagger]_\sigma = 0\,. \tag{29b}$$

$\hat{c}_k$ と $\hat{c}_k^\dagger$ を用いて $\hat{H}$ を表現

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &\equiv \int dx_1 \hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{h}_1^{(1)}\hat{\psi}(x_1) = \sum_{kk'} \hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_k \int \varphi_{k'}^*(x_1)\hat{h}_1^{(1)}\varphi_k(x_1)\,dx_1 \\ &= \sum_{kk'} \hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_k \varepsilon_k \int \varphi_{k'}^*(x_1)\varphi_k(x_1)\,dx_1 = \sum_{kk'} \hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_k \varepsilon_k \delta_{k'k} = \sum_k \varepsilon_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k\,.\end{aligned}$$

同様にして、

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\rm int} &\equiv \frac{1}{2}\int dx_1 \int dx_2\, \hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)\hat{h}_{12}^{(2)}\hat{\psi}(x_2)\hat{\psi}(x_1) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{k_1\cdots k_4} \langle k_1k_2|\hat{h}^{(2)}|k_3k_4\rangle \hat{c}_{k_1}^\dagger \hat{c}_{k_2}^\dagger \hat{c}_{k_4}\hat{c}_{k_3}\,.\end{aligned}$$

だたし、$\langle k_1k_2|\hat{h}^{(2)}|k_3k_4\rangle$ は次式で定義されている。

$$\langle k_1k_2|\hat{h}^{(2)}|k_3k_4\rangle \equiv \int dx_1 \int dx_2 \varphi_{k_1}^*(x_1)\varphi_{k_2}^*(x_2)\hat{h}_{12}^{(2)}\varphi_{k_4}(x_2)\varphi_{k_3}(x_1)\,. \tag{30a}$$

全ハミルトニアン $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\rm int}$

$$\hat{H} = \sum_k \varepsilon_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k + \frac{1}{2}\sum_{k_1\cdots k_4} \langle k_1k_2|\hat{h}^{(2)}|k_3k_4\rangle \hat{c}_{k_1}^\dagger \hat{c}_{k_2}^\dagger \hat{c}_{k_4}\hat{c}_{k_3}\,. \tag{30b}$$

11.5 相互作用のない N 粒子系の固有状態

- **第一量子化法での記述**

ハミルトニアン： $\displaystyle \hat{H} = \sum_{j=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_j^2 + U(\mathbf{r}_j)\right] \equiv \sum_{j=1}^N \hat{h}_j^{(1)}\,.$

固有状態

多粒子波動関数 $\Psi_\nu \longleftarrow$ 1粒子波動関数の積 $\varphi_{k_1}(x_1)\cdots\varphi_{k_N}(x_N)$ を対称化・反対称化
$\nu = (k_1, \cdots, k_N)$ — 1粒子固有状態の組み合わせ

(f) フェルミ粒子系 — 反対称化 ($\sigma = -1$)

$$\Psi_\nu(x_1, \cdots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P (-1)^P \langle x_1|k_{p_1}\rangle \cdots \langle x_N|k_{p_N}\rangle\,.$$

この右辺は行列式の定義式に他ならない。すなわち、波動関数は次のように書ける。

$$\Psi_\nu(x_1,\cdots,x_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\det\begin{bmatrix}\langle x_1|k_1\rangle & \cdots & \langle x_1|k_N\rangle\\ \vdots & & \vdots\\ \langle x_N|k_1\rangle & \cdots & \langle x_N|k_N\rangle\end{bmatrix}\qquad :\ \textbf{Slater 行列式}. \tag{31a}$$

$$\left\{\begin{array}{l}(k_1,\cdots,k_N)\\(x_1,\cdots,x_N)\end{array}\right.\ \text{の中に同じものがある}\longrightarrow \Psi_\nu(x_1,\cdots,x_N)=0:\ \textbf{Pauli 原理}$$

二つの同種粒子が同時に $\left\{\begin{array}{l}\textbf{同じ１粒子状態}\\ \textbf{同じ場所}\end{array}\right.$ **を占めることはできない。**

Ψ_ν が規格化されていることの証明

$$\int dx_1\cdots dx_N\Psi^*_\nu(x_1,\cdots,x_N)\Psi_\nu(x_1,\cdots,x_N)$$
$$=\frac{1}{N!}\sum_P\sum_{P'}(-1)^{P+P'}\underbrace{\prod_{j=1}^N\int dx_j\langle k_{p'_j}|x_j\rangle\langle x_j|k_{p_j}\rangle}_{\displaystyle \| \atop \displaystyle \prod_{j=1}^N\delta_{k_{p'_j}k_{p_j}}=\prod_{j=1}^N\delta_{p'_jp_j}=\delta_{P'P}}=\frac{1}{N!}\sum_P 1=1\,.$$

(b) ボーズ粒子系 — 対称化 ($\sigma=1$)

$\nu=(k_1,\cdots,k_1,\cdots,k_\ell,\cdots,k_\ell)$ の場合 —— 各 k_j の数は n_j 個で $\displaystyle\sum_{j=1}^{\ell}n_j=N$

$$\Psi_\nu(x_1,\cdots,x_N)=\frac{1}{\sqrt{N!n_1!n_2!\cdots n_\ell!}}\sum_P\langle x_1|k_{p_1}\rangle\cdots\langle x_N|k_{p_N}\rangle \tag{31b}$$

Ψ_ν が規格化されていることの証明

$$\int dx_1\cdots dx_N\Psi^*_\nu(x_1,\cdots,x_N)\Psi_\nu(x_1,\cdots,x_N)$$
$$=\frac{1}{N!n_1!n_2!\cdots n_\ell!}\sum_P\sum_{P'}\prod_{j=1}^N\int dx_j\langle k_{p'_j}|x_j\rangle\langle x_j|k_{p_j}\rangle$$

$\displaystyle\sum_P\sum_{P'}$ は、P' が恒等置換の場合を考えて結果を $N!$ 倍すればOK

$$=\frac{1}{N!n_1!n_2!\cdots n_\ell!}N!\sum_P\prod_{j=1}^N\langle k_j|k_{p_j}\rangle$$

積分が 0 にならない置換の数は $n_1!n_2!\cdots n_\ell!$

$$=\frac{1}{N!n_1!n_2!\cdots n_\ell!}N!n_1!n_2!\cdots n_\ell!$$
$$=1\,.$$

- **第二量子化法での記述**

ハミルトニアン： $\hat{H} = \sum_k \varepsilon_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k \,.$

固有状態

(f) **フェルミ粒子系**

$$|\Psi_\nu\rangle = \int dx_1 \cdots dx_N |x_1 \cdots x_N\rangle \Psi_\nu(x_1, \cdots, x_N)$$

$$|x_1 \cdots x_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{\psi}^\dagger(x_1) \cdots \hat{\psi}^\dagger(x_N)|0\rangle$$

$$\Psi_\nu(x_1, \cdots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \langle x_1 | k_{p_1}\rangle \cdots \langle x_N | k_{p_N}\rangle$$

$$= \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^P \int dx_1 \hat{\psi}^\dagger(x_1)\varphi_{k_{p_1}}(x_1) \cdots \int dx_N \hat{\psi}^\dagger(x_N)\varphi_{k_{p_N}}(x_N)|0\rangle$$

$$= \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^P \hat{c}_{k_{p_1}}^\dagger \cdots \hat{c}_{k_{p_N}}^\dagger |0\rangle$$

$$= \hat{c}_{k_1}^\dagger \cdots \hat{c}_{k_N}^\dagger |0\rangle \,.$$

すなわち、$|\Psi_\nu\rangle$ として次式が得られる。

$$|\Psi_\nu\rangle = \hat{c}_{k_1}^\dagger \cdots \hat{c}_{k_N}^\dagger |0\rangle \,. \tag{32a}$$

演算子 $\hat{c}_k^\dagger$ の入れ換えによる符号変化 $\longleftrightarrow$ Slater 行列式の列の入れ換えによる符号変化

Slater 行列式に較べてはるかに簡約化された表現！

(b) **ボーズ粒子系**

$\nu = (k_1, \cdots, k_1, \cdots, k_\ell, \cdots, k_\ell)$ の場合

$$|\Psi_\nu\rangle = \int dx_1 \cdots dx_N |x_1 \cdots x_N\rangle \Psi_\nu(x_1, \cdots, x_N)$$

$$|x_1 \cdots x_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{\psi}^\dagger(x_1) \cdots \hat{\psi}^\dagger(x_N)|0\rangle$$

$$\Psi_\nu(x_1, \cdots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N! n_1! \cdots n_\ell!}} \sum_P \langle x_1 | k_{p_1}\rangle \cdots \langle x_N | k_{p_N}\rangle$$

$$= \frac{1}{N!\sqrt{n_1! \cdots n_\ell!}} \sum_P \int dx_1 \hat{\psi}^\dagger(x_1)\varphi_{k_{p_1}}(x_1) \cdots \int dx_N \hat{\psi}^\dagger(x_N)\varphi_{k_{p_N}}(x_N)|0\rangle$$

$$= \frac{1}{N!\sqrt{n_1! \cdots n_\ell!}} \sum_P \hat{c}_{k_{p_1}}^\dagger \cdots \hat{c}_{k_{p_N}}^\dagger |0\rangle \qquad \longleftarrow \quad (\hat{c}_{k_1}^\dagger)^{n_1} \cdots (\hat{c}_{k_\ell}^\dagger)^{n_\ell} \text{の寄与が } N! \text{ 個}$$

$$= \frac{(\hat{c}_{k_1}^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \cdots \frac{(\hat{c}_{k_\ell}^\dagger)^{n_\ell}}{\sqrt{n_\ell!}} |0\rangle \,.$$

すなわち、$|\Psi_\nu\rangle$ として次式が得られる。

$$|\Psi_\nu\rangle = \frac{(\hat{c}_{k_1}^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \cdots \frac{(\hat{c}_{k_\ell}^\dagger)^{n_\ell}}{\sqrt{n_\ell!}} |0\rangle \,. \tag{32b}$$

調和振動子の固有状態と同じ表現！