Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan.

7. 多粒子系の量子力学

多体系のハミルトニアン

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\mathbb{P}_i^2}{2m_i} + V(x_1, \cdots, x_N)$$

$x = (\mathbb{r}, \mathbb{s})$ 座標とスピンを合わせて書いた一般化された座標

↑ スピン

$$H \Psi(x_1, x_2, \cdots, x_N) = E \Psi(x_1, x_2, \cdots, x_N)$$

規格化： $1 = \int dx_1 \cdots dx_N \, |\Psi(x_1, x_2, \cdots, x_N)|^2$

$$dx_1 = \int d\mathbb{r}_1 \sum_{s_{z1}}$$

7.1. 入れかえオペレーター：フェルミオンとボソン

同種粒子：区別できない

⇓

$N=2$ の系（2粒子系）を考えると

$$H = \frac{\mathbb{P}_1^2}{2m} + \frac{\mathbb{P}_2^2}{2m} + V(x_1, x_2)$$

で 1と2を入れかえても H は不変。

⇓

$$H = \underbrace{\frac{\mathbb{P}_1^2}{2m} + \frac{\mathbb{P}_2^2}{2m} + V(x_1, x_2)}_{\equiv H(1,2)} = \underbrace{\frac{\mathbb{P}_2^2}{2m} + \frac{\mathbb{P}_1^2}{2m} + V(x_2, x_1)}_{\equiv H(2,1)}$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan.

シュレーディンガー方程式：

$$H(1,2)\,\Psi(1,2) = E\,\Psi(1,2)$$

2つの粒子は区別できないので、どちらを"1"とよんでもよい。

↓

$$\underbrace{H(2,1)}_{=H(1,2)}\,\Psi(2,1) = E\,\Psi(2,1)$$

（名前のつけかえ）

・入れかえオペレーター P_{12}：

$$\boxed{P_{12}\,\Psi(1,2) \equiv \Psi(2,1)}$$

（粒子1と2を入れかえる）

⇓

$$\begin{aligned} H(1,2)\,P_{12}\Psi(1,2) &= E\,P_{12}\,\Psi(1,2) \\ &= P_{12}\,E\,\Psi(1,2) \\ &= P_{12}\,H(1,2)\,\Psi(1,2) \end{aligned}$$

⇓ $[H, P_{12}] = 0$

↕

ハミルトニアンは（$1 \leftrightarrow 2$）で不変。

Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan

$$P_{12}\,\Psi(1,2) = \Psi(2,1)$$

↓

$$(P_{12})^2\,\Psi(1,2) = P_{12}\,\Psi(2,1) = \Psi(1,2)$$

↓

$(P_{12})^2 = 1$ ↓ $P_{12} = \pm 1$.

↓

$$\Psi^{(\pm)}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Psi(1,2) \pm \Psi(2,1)\right]$$

の2通りが考えられる。

(note)・ $[H, P_{12}] = 0$ より波動関数は P_{12} の固有関数にもなっている必要あり

・ P_{12} の固有値は保存量.

〈自然法則〉 P_{12} の固有値は粒子の種類によって決まる。(例えば、実験のセットアップにより決まるものではない。)

・半整数スピン → $P_{12} = -1$ (フェルミ統計) "フェルミオン"
電子、陽子、中性子など

・整数スピン → $P_{12} = 1$ (ボーズ統計) "ボゾン"
π中間子など

◦N粒子系への拡張

Nコの同種フェルミオン(ボゾン)から成る系は どの 2粒子の入れかえに対し 反対称(対称)。

例) N=3の場合:

$$\Psi^{(\pm)}(1,2,3)=\frac{1}{\sqrt{6}}\left[\Psi(1,2,3)\pm\Psi(2,1,3)+\Psi(2,3,1)\pm\Psi(3,2,1)+\Psi(3,1,2)\pm\Psi(1,3,2)\right]$$

7.2, パウリ原理(パウリ排他律)とスレーター行列式

2個の同種フェルミオンは同じ状態をとることができない。

$$H=\underbrace{\frac{P_1^2}{2m}+V(x_1)}_{=h_1}+\underbrace{\frac{P_2^2}{2m}+V(x_2)}_{=h_2}$$

とする(1,2の相互作用なし)。
変数分離型 → 波動関数は積の形。

$$\left(\frac{P^2}{2m}+V(x)\right)\phi_n(x)=\varepsilon_n\phi_n(x)$$

を用いて

入れかえに対し反対称

$$\Psi^{(-)}(x_1,x_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\phi_n(x_1)\phi_{n'}(x_2)-\phi_{n'}(x_1)\phi_n(x_2)\right]$$

$n=n'$だと $\Psi^{(-)}(x_1,x_2)=0$ (パウリ原理)

Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan

相互作用しない N フェルミオン系

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{p_i^2}{2m} + V(x_i) \right)$$ と書ける場合

$$\Psi(x_1, \cdots, x_N) = \phi_{n_1}(x_1)\phi_{n_2}(x_2) \cdots \phi_{n_N}(x_N)$$
となる(変数分離)。

多体系の波動関数はこれを反対称化しなければならない。

・$N=2$ の場合

$$\Psi^{(-)}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) - \phi_1(x_2)\phi_2(x_1) \right)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) & \phi_1(x_2) \\ \phi_2(x_1) & \phi_2(x_2) \end{vmatrix}$$

・$N=3$ の場合

$$\Psi^{(-)}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{6}} [\Psi(1,2,3) - \Psi(2,1,3) + \Psi(2,3,1) - \Psi(3,2,1) + \Psi(3,1,2) - \Psi(1,3,2)]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} [\phi_1(1)\phi_2(2)\phi_3(3) - \phi_1(2)\phi_2(1)\phi_3(3) + \phi_1(2)\phi_2(3)\phi_3(1) - \phi_1(3)\phi_2(2)\phi_3(1) + \phi_1(3)\phi_2(1)\phi_3(2) - \phi_1(1)\phi_2(3)\phi_3(2)]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) & \phi_1(x_2) & \phi_1(x_3) \\ \phi_2(x_1) & \phi_2(x_2) & \phi_2(x_3) \\ \phi_3(x_1) & \phi_3(x_2) & \phi_3(x_3) \end{vmatrix}$$

Department of Physics
Tohoku University

Sendai, Japan

・一般に

$$\Psi^{(-)}(x_1,\cdots,x_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\phi_1(x_1) & \cdots & \phi_1(x_N)\\ \vdots & & \vdots \\ \phi_N(x_1) & \cdots & \phi_N(x_N)\end{vmatrix}$$

スレーター行列式

7.3 簡単な例：同種2粒子系

ハミルトニアンがスピンによらないとする

$$H=\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m}+\frac{\mathbf{p}_2^2}{2m}+V(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$$

→ 空間成分とスピン成分で波動関数が変数分離

$$\Psi(x_1,x_2)=\Psi_{空間}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\cdot\Psi_{スピン}$$

・スピン0ボゾンの場合

スピン部分はなし
→ 空間部分を対称化

$$\Psi_{空間}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)+\phi(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1)\right)$$

Department of Physics
Tohoku University

Sendai Japan

・スピン $\frac{1}{2}$ フェルミオンの場合

合成スピンは 0 か 1

入れかえで

$S=1$: $|\uparrow\uparrow\rangle$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$, $|\downarrow\downarrow\rangle$ ← 対称

$S=0$: $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ ← 反対称

粒子の入れかえで全波動関数が反対称となるためには

$S=1 \rightarrow$ 空間部分 反対称

$S=0 \rightarrow$ 〃 対称

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)\right)|S=1, S_z\rangle$$

又は

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)\right)|S=0\rangle$$