

7. 同種粒子

多体系のハミルトニアン

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2m_i} + V(x_1, \dots, x_N)$$

$$x = (r, s)$$

↑
スピン

座標とスピンを合わせて書いて
一般化した座標

$$H\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = E\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

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

||
 $\int dr_1 \sum_{S_{z1}}$

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

$$H = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} + V(x_1, x_2)$$

1 と 2 を入れかえても H は不変。

$$H = \underbrace{\frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m}}_{H(1,2)} + V(x_1, x_2) = \frac{P_2^2}{2m} + \underbrace{\frac{P_1^2}{2m}}_{H(2,1)} + V(x_2, x_1)$$

シュレディンガー方程式:

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

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。

↓

$$\underbrace{H(2, 1)}_{\parallel} \Psi(2, 1) = E \Psi(2, 1) \quad (\text{名前の } \searrow \text{ だけかえ})$$

$$H(1, 2)$$

入れかえオペレーター P_{12} :

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

(粒子 1 と 2 を入れかえる)

$$\Rightarrow [H, P_{12}] = 0$$

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

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

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

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

$$\Downarrow [H, P_{12}] = 0$$

↑

ハミルトン = $P > 12$ (1 ↔ 2) で不変。

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

↷

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

↷

$$(P_{12})^2 = 1 \quad \rightsquigarrow \quad P_{12} = \pm 1.$$

↷

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

の又通りが考えられる。

(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って決まるものではない。)

• 半整数スピン $\rightarrow P_{12} = -1$ (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 $\rightarrow P_{12} = 1$ (ボーズ統計) "ボソン"
 π 中間子 など

$$\begin{aligned} \text{(note)} \quad P_{12} \Psi^{(\pm)}(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [P_{12} \Psi(1, 2) \pm P_{12} \Psi(2, 1)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi(2, 1) \pm \Psi(1, 2)] \\ &= \pm \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi(1, 2) \pm \Psi(2, 1)] = \pm \Psi^{(\pm)}(1, 2) \end{aligned}$$

◦ N 粒子系 の 拡張

N の $\underbrace{\text{同種}}_{\text{フェルミオン (ボソン)}}$ から 成る 系 は $\underbrace{\text{と}}_{\text{の}}$ 2 粒子
の 入れかえ に対し 反対称 (対称)。

例) $N=3$ の 場合 :

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

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 同い 状態 を とる こ と が できない。

$$H = \underbrace{\frac{P_1^2}{2m} + V(x_1)}_{\hbar_1} + \underbrace{\frac{P_2^2}{2m} + V(x_2)}_{\hbar_2}$$

と およ び (1, 2 の 相互作用 なし)。

変数分離型 \rightarrow 波動関数は積の形。

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

を用いて

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

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

相互作用しない N 粒子系

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

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = \phi_{n_1}(x_1) \phi_{n_2}(x_2) \dots \phi_{n_N}(x_N)$$

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

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

• $N=3$ の場合

$$\begin{aligned} \Psi^{\uparrow}(x_1, x_2, x_3) &= \frac{1}{\sqrt{6}} [\Psi(1,2,3) - \Psi(2,1,3) + \Psi(2,3,1) \\ &\quad - \Psi(3,2,1) + \Psi(3,1,2) - \Psi(1,3,2)] \end{aligned}$$

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

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

• 一般に

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

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

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(r_1, r_2)$$

→ 空間成分とスピン成分で波動関数が変数分離

$$\Psi(x_1, x_2) = \Psi_{\text{空間}}(r_1, r_2) \cdot \Phi_{\text{スピン}}$$

• スピン = 0 ボソンの場合

スピン部分はなし

→ 空間部分を対称化

$$\Psi_{\text{空間}}(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi(r_1, r_2) + \phi(r_2, r_1))$$

・ $s=0$ のフェルミオンの場合

合成 $s=0$ は 0 か 1

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

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

↷

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi(r_1, r_2) - \phi(r_2, r_1)) |S=1, S_z\rangle$$

又は

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi(r_1, r_2) + \phi(r_2, r_1)) |S=0\rangle$$

↷