量子力学 III
複数の同一粒子からなる量子系：発展編 (第二量子化)

21B00349 宇佐見大希

2023 年 10 月 26 日

目次

問題番号	正誤
Q21-1.	(i) o (ii) o (iii) o (iv) o (v) o (vi) o (vii) o (viii) o (ix) o (x) o (xi) x
Q21-2.	o
Q21-3.	(i) o (ii) o (iii) o (iv) o (v) o (vi) o (vii) o (viii) o (ix) o (x) o (xi) o (xii) o (xiii) o (xiv) o (xv) o (xvi)
Q21-4.	(i) o (ii) o (iii) o (iv) o (v) o (vi) o
Q21-5.	(i) o (ii) o
Q21-6.	o
Q21-7.	(i) o (ii) o (iii) o (iv) o
Q21-8.	(i) o (ii) o (iii) o (iv) o
Q21-9.	(i) o (ii) o
Q21-10.	△
Q21-11.	o
Q21-12.	(i) o (ii) o (iii) o (iv) o (v) o (vi) o (vii) o (viii) o (ix) o
Q21-13.	o
Q21-14.	o
Q21-15.	o
Q21-16.	o
Q21-17.	(i) o (ii) o
Q21-18.	(i) o (ii) o
Q21-19.	(i) o (ii) o (iii) o (iv) o (v) o (vi) o
Q21-20.	(i) o (ii) o (iii) o (iv) o
Q21-21.	o

表 **1**　正誤表

このレポートでは複数の同一粒子系におけるさまざまな表現を導入することを目的とする.

1 もし、量子状態の対称化の要請がなかったら？

量子に関する実験を進めていくと複数の同一粒子はどうしても区別できないことが分かってきた. これを理論へ組み込む為に物理学者は「いかなる粒子状態は粒子交換に関して不変である」という論理の飛躍を用いて説明した.

$$\text{複数の同一粒子は区別できない.} \tag{1.1}$$
$$\iff \text{いかなる観測量の期待値は粒子交換に関して不変である.} \tag{1.2}$$
$$\Longleftarrow \text{いかなる粒子状態は粒子交換に関して不変である.} \tag{1.3}$$

この要請を「対称化の要請」と呼ぶ. ここでは対称化の要請をせずに複数の同一粒子を区別できないという事実だけで導けることを考える.

定義 1.1 (複数の同一粒子系における Hilbert 空間)**.**
1 粒子状態の Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{single}$ に対して N 個の粒子の粒子状態の Hilbert 空間はテンソル積 $\mathcal{H}^{(N)} \cong \mathcal{H}_{single} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_{single}$ で表現される. そして $\mathcal{H}^{(N)}$ の粒子状態は $|\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle \in \mathcal{H}^{(N)}$ と書き, 定数倍は同一視する. また $|\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle, |\psi_1'\rangle \cdots |\psi_N'\rangle$ の内積は次のように定義する.

$$(\langle\psi_1| \cdots \langle\psi_N|) \cdot (|\psi_1'\rangle \cdots |\psi_N'\rangle) = \langle\psi_1|\psi_1'\rangle \cdots \langle\psi_N|\psi_N'\rangle. \tag{1.4}$$

異なる 1 粒子状態 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}_{single}$ を持つ粒子による 2 つの粒子系 $\mathcal{H}^{(2)} \cong \mathcal{H}_{single} \otimes \mathcal{H}_{single}$ において次の 2 つを仮定する.

1. 2 つの粒子は区別できない.
2. 粒子の 1 個が $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}_{single}$ となり, もう 1 個は $|\beta\rangle \in \mathcal{H}_{single}$ となる. (これを仮定 D とおく)

これらの条件は次のように言い換えられる.

1. いかなる観測量の期待値は粒子交換に関して不変である.
2. 任意の粒子状態 $|\Psi\rangle$ は $|\alpha\rangle|\beta\rangle, |\beta\rangle|\alpha\rangle \in \mathcal{H}^{(2)}$ の重ね合わせにより表現できる.

粒子状態については規格化条件を用いて次のように表現できる.

$$|\Psi\rangle = c_1|\alpha\rangle|\beta\rangle + c_2|\beta\rangle|\alpha\rangle \qquad (c_1, c_2 \in \mathbb{C}, |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1). \tag{1.5}$$

今後の為に粒子交換を表す演算子を定義しておく.

定義 1.2 (交換演算子)**.**
Hilbert 空間 $\mathcal{H}^{(2)}$ において交換演算子 (exchange operator) $\hat{E}$ を次のように定義する.

$$\hat{E}|\psi\rangle|\psi'\rangle = |\psi'\rangle|\psi\rangle. \tag{1.6}$$

問題 1.3 (Q21-1(i))**.**

粒子が区別できないならば粒子状態を区別できないとは示せないが, ここでは粒子状態を区別できないと仮定する. このとき粒子状態 $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^{(2)}$ は粒子を交換しても不変であるから位相を考慮して次の式が成り立つ.

$$|\Psi\rangle = \hat{E}|\Psi\rangle \iff c_1|\alpha\rangle|\beta\rangle + c_2|\beta\rangle|\alpha\rangle = c_1|\beta\rangle|\alpha\rangle + c_2|\alpha\rangle|\beta\rangle \iff c_1 = \pm c_2. \tag{1.7}$$

よって粒子状態は次のようになる.

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle \pm |\beta\rangle|\alpha\rangle). \tag{1.8}$$

これより粒子状態を区別できないならば係数に対して条件を足さなければならないことが分かる. ◇

命題 1.4 (Q21-1(ii))**.**

粒子状態 $|\Psi_S\rangle, |\Psi_A\rangle$ を次のように定義する.

$$\begin{cases} |\Psi_S\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle) \\ |\Psi_A\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle) \end{cases}. \tag{1.9}$$

このとき D を満たす任意の粒子状態 $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^{(2)}$ は次のように表現される.

$$|\Psi\rangle = c_S|\Psi_S\rangle + c_A|\Psi_A\rangle. \tag{1.10}$$

◇

証明

D を満たす任意の粒子状態 $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^{(2)}$ は次のように書ける.

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= c_1|\alpha\rangle|\beta\rangle + c_2|\beta\rangle|\alpha\rangle && (1.11) \\ &= \frac{c_1+c_2}{2}(|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle) + \frac{c_1-c_2}{2}(|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle) && (1.12) \\ &= \frac{c_1+c_2}{\sqrt{2}}|\Psi_S\rangle + \frac{c_1-c_2}{\sqrt{2}}|\Psi_A\rangle. && (1.13) \end{aligned}$$

よって次のように係数をおくことで $|\Psi\rangle$ は $|\alpha\rangle|\beta\rangle, |\beta\rangle|\alpha\rangle$ と $|\Psi_S\rangle, |\Psi_A\rangle$ のそれぞれの重ね合わせが同値な表現となることがわかる.

$$c_S = \frac{c_1+c_2}{\sqrt{2}}, \quad c_A = \frac{c_1-c_2}{\sqrt{2}} \tag{1.14}$$

$$c_1 = \frac{c_S+c_A}{\sqrt{2}}, \quad c_2 = \frac{c_S-c_A}{\sqrt{2}}. \tag{1.15}$$

□

命題 1.5 (Q21-1(iii)(iv)(v))**.**

交換演算子について次の性質が認められる.

$$\hat{E} = \hat{E}^\dagger = \hat{E}^{-1}, \quad \hat{E}^2 = \hat{1} \tag{1.16}$$

$$\hat{E}|\Psi\rangle = c_S|\Psi_S\rangle - c_A|\Psi_A\rangle. \tag{1.17}$$

◇

証明

まず粒子状態 $|\psi\rangle|\psi'\rangle = |\alpha\rangle|\beta\rangle, |\beta\rangle|\alpha\rangle$ に対して演算子 $\hat{E}^{-1}, \hat{E}^\dagger$ を適用する.

$$\hat{E}^{-1}|\psi\rangle|\psi'\rangle = \hat{E}^{-1}\hat{E}|\psi'\rangle|\psi\rangle = |\psi'\rangle|\psi\rangle \tag{1.18}$$

$$\langle\psi|\langle\psi'|\hat{E}^\dagger\hat{E}|\psi\rangle|\psi'\rangle = \langle\psi'|\langle\psi|\psi'\rangle|\psi\rangle = \langle\psi|\langle\psi'|\psi\rangle|\psi'\rangle. \tag{1.19}$$

これより次のことが分かる.

$$\hat{E} = \hat{E}^\dagger = \hat{E}^{-1}, \qquad \hat{E}^2 = \hat{E}\hat{E}^{-1} = \hat{1}. \tag{1.20}$$

次に粒子状態 $|\Psi_S\rangle, |\Psi_A\rangle$ に適用すると

$$\hat{E}|\Psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{E}(|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle) = +\frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle) = +|\Psi_S\rangle \tag{1.21}$$

$$\hat{E}|\Psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{E}(|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle) = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle) = -|\Psi_A\rangle. \tag{1.22}$$

となるから任意の状態 $|\Psi\rangle$ に適用すると次のようになる.

$$\hat{E}|\Psi\rangle = \hat{E}(c_S|\Psi_S\rangle + c_A|\Psi_A\rangle) = c_S|\Psi_S\rangle - c_A|\Psi_A\rangle. \tag{1.23}$$

□

命題 1.6 (Q21-1(vi)(vii)(viii))**.**

Hilbert 空間 $\mathcal{H}^{(2)}$ の任意の観測量 $\hat{O}$ について 2 つの粒子を区別できないことと次の 3 つはそれぞれ同値である.

1. 期待値 $\langle\hat{O}\rangle$ は粒子交換に関して不変である.
2. 観測量 $\hat{O}$ は粒子交換に関して不変である. つまり $\hat{O} = \hat{E}\hat{O}\hat{E}$ である.
3. 観測量 $\hat{O}$ と交換演算子 $\hat{E}$ は可換である.

◇

証明

1 から 2 を示す. 期待値について $|\Psi\rangle \to \hat{E}|\Psi\rangle$ と状態を変更しても不変であるから次のようになる.

$$\langle\hat{O}\rangle = \langle\Psi|\hat{O}|\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{E}^\dagger\hat{O}\hat{E}|\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{E}\hat{O}\hat{E}|\Psi\rangle. \tag{1.24}$$

これより $\hat{O} = \hat{E}\hat{O}\hat{E}$ となり, $\hat{O}$ は粒子交換に関して不変であることがわかる. 念のため $\hat{E}\hat{O}\hat{E}$ について $(\hat{E}\hat{O}\hat{E})^\dagger = \hat{E}^\dagger\hat{O}^\dagger\hat{E}^\dagger = \hat{E}\hat{O}\hat{E}$ と計算できるから $\hat{E}\hat{O}\hat{E}$ は Hermite 演算子となり整合性は保っている.
次に 2 から 3 を示す.

$$\hat{E}\hat{O} = \hat{E}\hat{E}\hat{O}\hat{E} = \hat{O}\hat{E}. \tag{1.25}$$

つまり $[\hat{O}, \hat{E}] = 0$ であるから $\hat{O}, \hat{E}$ は可換である. 最後に 3 から 1 は $\hat{E}^\dagger\hat{O}\hat{E} = \hat{E}^\dagger\hat{E}\hat{O} = \hat{O}$ より成り立つ. よって全て互いに同値であることは示された. □

命題 1.7 (Q21-1(ix)).

観測量 $\hat{O}$ の期待値 $\langle\hat{O}\rangle$ について次のように書ける.

$$\langle\hat{O}\rangle = |c_S|^2\langle\Psi_S|\hat{O}|\Psi_S\rangle + |c_A|^2\langle\Psi_A|\hat{O}|\Psi_A\rangle. \tag{1.26}$$

◇

証明

観測量 $\hat{O}$ の期待値 $\langle\hat{O}\rangle$ は次のように計算できる.

$$\begin{aligned}
\langle\hat{O}\rangle &= \langle\Psi|\hat{O}|\Psi\rangle &(1.27)\\
&= (c_S^*\langle\Psi_S| + c_A^*\langle\Psi_A|)\hat{O}(c_S|\Psi_S\rangle + c_A|\Psi_A\rangle) &(1.28)\\
&= |c_S|^2\langle\Psi_S|\hat{O}|\Psi_S\rangle + |c_A|^2\langle\Psi_A|\hat{O}|\Psi_A\rangle + c_S^*c_A\langle\Psi_S|\hat{O}|\Psi_A\rangle + c_A^*c_S\langle\Psi_A|\hat{O}|\Psi_S\rangle &(1.29)\\
&= |c_S|^2\langle\Psi_S|\hat{O}|\Psi_S\rangle + |c_A|^2\langle\Psi_A|\hat{O}|\Psi_A\rangle. &(1.30)
\end{aligned}$$

ただし式 (1.30) において次のような計算をした.

$$\begin{aligned}
\langle\Psi_S|\hat{O}|\Psi_A\rangle &= \langle\Psi_S|\hat{E}\hat{O}\hat{E}|\Psi_A\rangle = -\langle\Psi_S|\hat{O}|\Psi_A\rangle = 0 &(1.31)\\
\langle\Psi_A|\hat{O}|\Psi_S\rangle &= \langle\Psi_A|\hat{E}\hat{O}\hat{E}|\Psi_S\rangle = -\langle\Psi_A|\hat{O}|\Psi_S\rangle = 0. &(1.32)
\end{aligned}$$

□

問題 1.8 (Q21-1(x)).

例えば $\hat{O} = 2|\beta\rangle|\alpha\rangle\langle\alpha|\langle\beta|$ とすると

$$\begin{aligned}
\langle\Psi_S|\hat{O}|\Psi_S\rangle &= \frac{1}{2}(\langle\alpha|\langle\beta| + \langle\beta|\langle\alpha|)\hat{O}(|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle) = +1 &(1.33)\\
\langle\Psi_A|\hat{O}|\Psi_A\rangle &= \frac{1}{2}(\langle\alpha|\langle\beta| - \langle\beta|\langle\alpha|)\hat{O}(|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle) = -1. &(1.34)
\end{aligned}$$

より c_S, c_A は互いに依存しない. ◇

問題 1.9 (Q21-1(xi)).

交換演算子が Hilbert 空間の代数構造において既約元であることは直感的に成り立つので, 区別できない情報が観測量の演算子に吸収され, 粒子状態の粒子を区別できないとは示せない. 問題 1.3 のようには係数は決まらず, 理論の予言能力に問題はない. ◇

公理 1.10 (対称化の要請).

いかなる粒子状態は粒子交換に関して不変である.

2 n 次対称群 $\mathfrak{S}_n$

前章の 2 粒子系で交換演算子を導入したが一般の N 個の粒子系において対応するものが置換演算子である. それを導入する前段階として n 次対称群を整理する.

定義 2.1 (n 次対称群)**.**
X を集合とするとき X から X への全単射写像 $\sigma : X \to X$ を X の置換という. σ, τ を置換とするとき, その積 $\sigma\tau$ を写像としての合成 $\sigma \circ \tau$ と定義する. X の置換全体の集合はこの演算により群となり, これを X の置換群という. $\mathbb{Z}_n := \{1, 2, \ldots, n\}$ の置換群を n 次対称群といい $\mathfrak{S}_n$ と書く.

繰り返すが置換の積は写像の合成であり写像は右結合である. (Q21-2(i))

問題 2.2 (Q21-2(ii))**.**
$X = \{0, 1, 2, 3\}$ の置換群 G に対して $\sigma, \tau \in G$ の積 $\sigma\tau$ を計算せよ.

$$\sigma = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad , \quad \tau = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.1}$$

◇

証明

$$\sigma\tau = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 0 & 2 & 3 \end{pmatrix}. \tag{2.2}$$

□

定理 2.3 (Q21-3(i)(ii)(iii)(iv))**.**
n 次対称群 $\mathfrak{S}_n$ は群である. ◇

証明

$\sigma, \tau \in \mathfrak{S}_n$ に対して $\sigma\tau = \sigma \circ \tau$ が全単射写像であることを示す. まず $\sigma\tau$ の全射性について σ の全射性より任意の $c \in X$ に対して $\sigma(b) = c$ となる $b \in X$ があり, $\tau(a) = b$ となる $a \in X$ がある. これより任意の c に対して次を満たす a がある.

$$\sigma\tau(a) = \sigma \circ \tau(a) = \sigma(\tau(a)) = c. \tag{2.3}$$

また $\sigma\tau$ の単射性についてはそれぞれの単射性より次のように満たされる.

$$\sigma\tau(a) = \sigma\tau(b) \implies \tau(a) = \tau(b) \implies a = b. \tag{2.4}$$

これより積について閉じていることが分かる.

単位元は X の恒等写像 id_X とすることで任意の $\sigma \in \mathfrak{S}_n$ に対して $\sigma \mathrm{id}_X = \mathrm{id}_X \sigma = \sigma$ を満たす.

また任意の元 $\sigma \in \mathfrak{S}_n$ に対する逆元は逆像 σ^{-1} とすることで $\sigma\sigma^{-1} = \mathrm{id}_X$ を満たす.

そして定義から結合法則 $\sigma_1(\sigma_2\sigma_3) = (\sigma_1\sigma_2)\sigma_3$ も満たすことが分かる.

よって n 次対称群 $\mathfrak{S}_n$ は群となる. □

命題 2.4 (Q21-4)**.**
n 次対称群 $\mathfrak{S}_n$ の位数は $n!$ である. ◇

証明

全単射写像は X の順列で被覆できるから位数は $n!$ となる. $\square$

命題 2.5 (Q21-5(i)(ii), Q21-6(i)(ii))**.**
$\sigma_0 \in \mathfrak{S}_n$ とすると $\mathfrak{S}_n = \sigma_0\mathfrak{S}_n = \mathfrak{S}_n\sigma_0 = \mathfrak{S}_n^{-1}$ である. $\diamond$

証明

σ_0 を左から掛けることに対して σ_0^{-1} を左から掛けることは逆写像となるから, 全単射となる. よって $\sigma_0\mathfrak{S}_n = \mathfrak{S}_n$ となる. 逆も同様なので $\mathfrak{S}_n\sigma_0 = \mathfrak{S}_n$ となる. また群の性質より各元の逆元は唯一であるから $\mathfrak{S}_n^{-1} = \mathfrak{S}_n$ となる. これより群 R に対して関数 $f : \mathfrak{S}_n \to R$ があるとき次のようになる.

$$\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_n} f(\sigma) = \sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_n} f(\sigma_0\sigma) = \sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_n} f(\sigma\sigma_0) = \sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_n} f(\sigma^{-1}) \tag{2.5}$$

$\square$

定義 2.6 (互換, 巡回置換)**.**
置換 $\sigma \in \mathfrak{S}_n$ に対して $1 \leq i < j \leq n$ のとき $k \neq i, j$ なら $\sigma(k) = k$ で $\sigma(i) = j$, $\sigma(j) = i$ であるとき σ を互換といい $(i\ j)$ と書く. より一般に $i_1 \mapsto i_2 \mapsto \cdots \mapsto i_m \mapsto i_1$ と移し, 他の元は変えない置換を巡回置換といい $(i_1\ \cdots\ i_m)$ と書く.

補題 2.7.
任意の置換は一意の巡回置換の積で表現できる. $\diamond$

証明

置換 $\sigma \in \mathfrak{S}_n$ においてある元 $i_1 \in X$ を選び, 移していくと鳩ノ巣原理より必ず $i_1 \mapsto i_2 \mapsto \cdots \mapsto i_m \mapsto i_1$ と巡回する. これより巡回置換 $(i_1\ \cdots\ i_m)$ と $i_1, \ldots, i_m$ を変えず他の元を $i \mapsto \sigma(i)$ とする置換 σ' を用いて $\sigma = (i_1\ \cdots\ i_m)\sigma'$ と表現できる. 次は σ' の $i_1, \ldots, i_m$ ではない元に対してと, 帰納的に同様の操作をすることで置換は巡回置換の積で表せられ, 積の順番を除いて一意に定まることが分かる. $\square$

定理 2.8 (Q21-7(i))**.**
任意の置換は互換の積で表現できる. $\diamond$

証明

任意の置換は巡回置換の積で表現できるから, 巡回置換が互換の積で表せられることを示せればよい.

$$\begin{aligned}
(i_1\ i_2\ \cdots\ i_m) &= (i_1\ i_3\ \cdots\ i_m)(i_1\ i_2) &(2.6)\\
&= (i_1\ i_4\ \cdots\ i_m)(i_1\ i_3)(i_1\ i_2) &(2.7)\\
&= (i_1\ i_m)(i_1\ i_{m-1})\cdots(i_1\ i_3)(i_1\ i_2). &(2.8)
\end{aligned}$$

これは上のように変形することにより示される. $\square$

定義 2.9 (符号)**.**
置換 $\sigma \in \mathfrak{S}_n$ の符号 $\operatorname{sgn}\sigma = (-1)^\sigma$ を次のように定義する.

$$\operatorname{sgn}\sigma = (-1)^\sigma = \begin{cases} +1 & (\sigma\text{が偶数個の互換の積で表される}) \\ -1 & (\sigma\text{が奇数個の互換の積で表される}) \end{cases}. \tag{2.9}$$

命題 2.10 (Q21-7(ii))**.**
置換の符号は well-defined である. ◇

証明
次のように定義される差積 $\Delta(x_1, \ldots, x_n)$ を置換 $\sigma \in \mathfrak{S}_n$ 用いて変数の添字を置換することを考える.

$$\Delta(x_1, \ldots, x_n) = \prod_{1 \leq i < j \leq n} (x_j - x_i). \tag{2.10}$$

互換 $\sigma = (i\ j)$ で置換するとそれぞれ次のようになるから $\Delta(x_{\sigma(1)}, \ldots, x_{\sigma(n)}) = -\Delta(x_1, \ldots, x_n)$ となる.

$$(x_j - x_i) \mapsto -(x_j - x_i) \tag{2.11}$$
$$(x_a - x_i)(x_a - x_j) \mapsto (x_a - x_i)(x_a - x_j) \tag{2.12}$$
$$(x_i - x_a)(x_a - x_j) \mapsto (x_i - x_a)(x_a - x_j) \tag{2.13}$$
$$(x_i - x_a)(x_j - x_a) \mapsto (x_i - x_a)(x_j - x_a). \tag{2.14}$$

これより置換 $\sigma \in \mathfrak{S}_n$ が異なる互換の積 $\sigma = \sigma_1 \cdots \sigma_k = \tau_1 \cdots \tau_m$ で表されたとき

$$\Delta(x_{\sigma(1)}, \ldots, x_{\sigma(n)}) = (-1)^k \Delta(x_1, \ldots, x_n) = (-1)^m \Delta(x_1, \ldots, x_n). \tag{2.15}$$

となる為, 互換の積の個数の偶奇は一致する. □

命題 2.11 (Q21-8(i)(ii)(iii))**.**
置換の符号 $\operatorname{sgn} : \mathfrak{S}_n \to \mathbb{Z}^\times$ は準同型写像である. ◇

証明
差積を用いることで

$$\operatorname{sgn}(\sigma\tau)\Delta(x_1, \ldots, x_n) = \Delta(x_{\sigma\tau(1)}, \ldots, x_{\sigma\tau(n)}) \tag{2.16}$$
$$= \operatorname{sgn}(\sigma)\Delta(x_{\tau(1)}, \ldots, x_{\tau(n)}) = \operatorname{sgn}(\sigma)\operatorname{sgn}(\tau)\Delta(x_1, \ldots, x_n). \tag{2.17}$$

より準同型の性質 $\operatorname{sgn}(\sigma\tau) = \operatorname{sgn}(\sigma)\operatorname{sgn}(\tau)$ が成り立つ. 準同型であるから次が成り立つ.

$$\operatorname{sgn}(\mathrm{id}_X) = \operatorname{sgn}(\mathrm{id}_X)\operatorname{sgn}(\mathrm{id}_X) = 1 \tag{2.18}$$
$$\operatorname{sgn}(\sigma^{-1}) = \operatorname{sgn}(\mathrm{id}_X)\operatorname{sgn}(\sigma)^{-1} = \operatorname{sgn}(\sigma)^{-1} = \operatorname{sgn}(\sigma) \tag{2.19}$$

□

3　完全対称な状態と完全反対称な状態の数学的取り扱い

定義 3.1 (置換演算子)**.**
N 個の同一の粒子 $X_1, \ldots, X_N$ からなる全体系の Hilbert 空間 $\mathcal{H}^{(N)}$ において置換 $\sigma \in \mathfrak{S}_N$ を用いた置換演算子 $\hat{P}(\sigma)$ を状態に対して粒子 X_i を粒子 $X_{\sigma(i)}$ に置き換える演算子とする.

命題 3.2 (Q21-9, Q21-10(i)(ii))**.**
粒子状態に対して置換演算子 $\hat{P}(\sigma)$ は次のように作用する.

$$\hat{P}(\sigma)|\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle = \left|\psi_{\sigma^{-1}(1)}\right\rangle \cdots \left|\psi_{\sigma^{-1}(N)}\right\rangle \tag{3.1}$$

$$\hat{P}^\dagger(\sigma)|\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle = \left|\psi_{\sigma(1)}\right\rangle \cdots \left|\psi_{\sigma(N)}\right\rangle \tag{3.2}$$

◇

証明
置換演算子の行列表示について置換演算子を適用すると粒子 X_i における状態は元々 $X_{\sigma^{-1}(i)}$ であるから次のようになる.

$$\begin{aligned}\langle\xi_1| \cdots \langle\xi_N|\hat{P}(\sigma)|\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle &= \langle\xi_1| \cdots \langle\xi_N|\psi_{\sigma^{-1}(1)}\rangle \cdots |\psi_{\sigma^{-1}(N)}\rangle &(3.3)\\ &= \langle\xi_{\sigma(1)}| \cdots \langle\xi_{\sigma(N)}|\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle &(3.4)\end{aligned}$$

これは次のように波動関数表示で書けば粒子 X_i の状態を粒子 $X_{\sigma(i)}$ の状態に置き換えていると解釈できる.

$$\langle\xi_1|\langle\xi_2| \cdots \langle\xi_N|\hat{P}(\sigma)|\Psi\rangle = \left\langle \xi_{\sigma(1)}\right|\left\langle \xi_{\sigma(2)}\right| \cdots \left\langle \xi_{\sigma(N)}\middle|\Psi\right\rangle \tag{3.5}$$

$$(\hat{P}(\sigma)\Psi)(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N) = \Psi(\xi_{\sigma(1)}, \xi_{\sigma(2)}, \ldots, \xi_{\sigma(N)}). \tag{3.6}$$

これより任意の粒子状態 $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^{(N)}$ に置換演算子を適用すると次のようになる.

$$|\Psi\rangle = \sum_i c^{(i)}\left|\psi_1^{(i)}\right\rangle \cdots \left|\psi_N^{(i)}\right\rangle \tag{3.7}$$

$$\hat{P}(\sigma)|\Psi\rangle = \sum_i c^{(i)}\left|\psi_{\sigma^{-1}(1)}^{(i)}\right\rangle \cdots \left|\psi_{\sigma^{-1}(N)}^{(i)}\right\rangle \tag{3.8}$$

$$\hat{P}^\dagger(\sigma)|\Psi\rangle = \sum_i c^{(i)}\left|\psi_{\sigma(1)}^{(i)}\right\rangle \cdots \left|\psi_{\sigma(N)}^{(i)}\right\rangle. \tag{3.9}$$

□

定理 3.3 (Q21-11(i)(ii)(iii)(iv))**.**
$\hat{P}(\sigma)$ は unitary な準同型演算子である. ◇

証明

まず unitary 演算子であることは次のようにして成り立つ.

$$\hat{P}(\sigma)^\dagger \hat{P}(\sigma)|\Psi\rangle = \left|\psi_{\sigma\sigma^{-1}(1)}\right\rangle \cdots \left|\psi_{\sigma\sigma^{-1}(N)}\right\rangle = |\Psi\rangle \tag{3.10}$$

$$\hat{P}(\sigma)\hat{P}(\sigma)^\dagger |\Psi\rangle = \left|\psi_{\sigma^{-1}\sigma(1)}\right\rangle \cdots \left|\psi_{\sigma^{-1}\sigma(N)}\right\rangle = |\Psi\rangle. \tag{3.11}$$

そして準同型であることは次のようにして成り立つ.

$$\hat{P}(\sigma\tau)|\Psi\rangle = \left|\psi_{(\sigma\tau)^{-1}(1)}\right\rangle \cdots \left|\psi_{(\sigma\tau)^{-1}(N)}\right\rangle \tag{3.12}$$

$$= \hat{P}(\sigma)\left|\psi_{\tau^{-1}(1)}\right\rangle \cdots \left|\psi_{\tau^{-1}(N)}\right\rangle \tag{3.13}$$

$$= \hat{P}(\sigma)\hat{P}(\tau)|\Psi\rangle. \tag{3.14}$$

よって $\hat{P}(\sigma)$ は unitary な準同型である. 準同型の性質より

$$\hat{P}(\mathrm{id}_X) = \hat{1} \tag{3.15}$$

$$\hat{P}(\sigma^{-1}) = \hat{P}(\sigma)^{-1} \tag{3.16}$$

となる. □

定義 3.4 (完全対称, 完全反対称)**.**
Hilbert 空間の状態 $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^{(N)}$ において任意の置換 $\sigma \in \mathfrak{S}_N$ に対して $\hat{P}(\sigma)|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$ となるとき完全対称, $\hat{P}(\sigma)|\Psi\rangle = \mathrm{sgn}(\sigma)|\Psi\rangle$ となるとき完全反対称であると定義する. そして完全対称, 完全反対称な状態のなす Hilbert 空間を $\mathcal{H}_S^{(N)}, \mathcal{H}_A^{(N)}$ と書き, 全 Hilbert 空間 $\mathcal{H}^{(N)}$ から $\mathcal{H}_S^{(N)}, \mathcal{H}_A^{(N)}$ への射影演算子を $\hat{\mathcal{S}}^{(N)}, \hat{\mathcal{A}}^{(N)}$ とする.

補題 3.5 (Q21-12(i)(ii))**.**
任意の互換 $\sigma \in \mathfrak{S}_N$ に対して $\hat{P}(\sigma)|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$, $\hat{P}(\sigma)|\Psi\rangle = -|\Psi\rangle$ となることは完全対称, 完全反対称であることと同値である. ◇

証明
任意の置換 $\sigma \in \mathfrak{S}_N$ は互換の積で表現できるから互換 $\sigma_1, \ldots, \sigma_m \in \mathfrak{S}_N$ を用いて $\sigma = \sigma_1 \cdots \sigma_m$ と書け, 次のようになる.

$$\hat{P}(\sigma)|\Psi\rangle = |\Psi\rangle = (+1)^m|\Psi\rangle \qquad \text{(完全対称)} \tag{3.17}$$

$$\hat{P}(\sigma)|\Psi\rangle = \mathrm{sgn}(\sigma)|\Psi\rangle = (-1)^m|\Psi\rangle \qquad \text{(完全反対称)} \tag{3.18}$$

これより同値であることがわかる. □

命題 3.6 (Q21-13(i)(ii))**.**
$\mathcal{H}_S^{(N)}$ と $\mathcal{H}_A^{(N)}$ は直交し, その直和について次のようになる.

$$\begin{cases} \mathcal{H}_S^{(2)} \oplus \mathcal{H}_A^{(2)} = \mathcal{H}^{(2)} \\ \mathcal{H}_S^{(N)} \oplus \mathcal{H}_A^{(N)} \subsetneq \mathcal{H}^{(N)} \quad (N \geq 3) \end{cases} \tag{3.19}$$

$\diamond$

証明

$|\Psi_S\rangle \in \mathcal{H}_S^{(N)}$, $|\Psi_A\rangle \in \mathcal{H}_A^{(N)}$ の内積について互換 σ の演算子を挿入することで求まる.

$$\langle\Psi_S|\Psi_A\rangle = \langle\Psi_S|\hat{P}(\sigma)^\dagger\hat{P}(\sigma)|\Psi_A\rangle \tag{3.20}$$
$$= -\langle\Psi_S|\Psi_A\rangle = 0. \tag{3.21}$$

これより $\mathcal{H}_S^{(N)}$ と $\mathcal{H}_A^{(N)}$ は直交する. 次に $N=2$ における $\mathcal{H}_S^{(N)}, \mathcal{H}_A^{(N)}$ は次のように表現できる.

$$\sum_i c^{(i)}\left(\left|\psi_1^{(i)}\right\rangle\left|\psi_2^{(i)}\right\rangle + \left|\psi_2^{(i)}\right\rangle\left|\psi_1^{(i)}\right\rangle\right) \in \mathcal{H}_S^{(2)} \tag{3.22}$$
$$\sum_i c^{(i)}\left(\left|\psi_1^{(i)}\right\rangle\left|\psi_2^{(i)}\right\rangle - \left|\psi_2^{(i)}\right\rangle\left|\psi_1^{(i)}\right\rangle\right) \in \mathcal{H}_A^{(2)}. \tag{3.23}$$

これよりこれらの直和は全空間 $\mathcal{H}^{(2)}$ を表現できる. $N=3$ における $\mathcal{H}_S^{(N)}, \mathcal{H}_A^{(N)}$ の元は例えば次のようになる.

$$|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle|\psi_3\rangle + |\psi_2\rangle|\psi_3\rangle|\psi_1\rangle + |\psi_3\rangle|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle + |\psi_1\rangle|\psi_3\rangle|\psi_2\rangle + |\psi_2\rangle|\psi_1\rangle|\psi_3\rangle + |\psi_3\rangle|\psi_2\rangle|\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_S^{(N)} \tag{3.24}$$
$$|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle|\psi_3\rangle + |\psi_2\rangle|\psi_3\rangle|\psi_1\rangle + |\psi_3\rangle|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle - |\psi_1\rangle|\psi_3\rangle|\psi_2\rangle - |\psi_2\rangle|\psi_1\rangle|\psi_3\rangle - |\psi_3\rangle|\psi_2\rangle|\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_A^{(N)}. \tag{3.25}$$

これよりこれらの直和でも全空間は表現できない. $N>3$ も同様である. $\square$

定理 3.7 (Q21-14(i)(ii)(iii))**.**

射影演算子 $\hat{\mathcal{S}}^{(N)}, \hat{\mathcal{A}}^{(N)}$ は次のように表現される.

$$\hat{\mathcal{S}}^{(N)} = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\hat{P}(\sigma) \tag{3.26}$$
$$\hat{\mathcal{A}}^{(N)} = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma)\hat{P}(\sigma). \tag{3.27}$$

$\diamond$

証明

演算子 $\hat{\mathcal{S}}^{(N)}, \hat{\mathcal{A}}^{(N)}$ に対して置換演算子 $\hat{P}(\tau)$ を適用すると次のようになる.

$$\hat{P}(\tau)\hat{\mathcal{S}}^{(N)} = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\hat{P}(\tau\sigma) = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma'\in\mathfrak{S}_N}\hat{P}(\sigma') = \hat{\mathcal{S}}^{(N)} \tag{3.28}$$
$$\hat{P}(\tau)\hat{\mathcal{A}}^{(N)} = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma)\hat{P}(\tau\sigma) = \mathrm{sgn}(\tau)\frac{1}{N!}\sum_{\sigma'\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma')\hat{P}(\sigma') = \mathrm{sgn}(\tau)\hat{\mathcal{A}}^{(N)}. \tag{3.29}$$

これより演算子 $\hat{\mathcal{S}}^{(N)} : \mathcal{H}^{(N)} \to \mathcal{H}_S^{(N)}, \hat{\mathcal{A}}^{(N)} : \mathcal{H}^{(N)} \to \mathcal{H}_A^{(N)}$ となる.

$$(\hat{\mathcal{S}}^{(N)})^2 = \frac{1}{N!^2}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\hat{P}(\sigma\tau) = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma'\in\mathfrak{S}_N}\hat{P}(\sigma') = \hat{\mathcal{S}}^{(N)} \tag{3.30}$$
$$(\hat{\mathcal{A}}^{(N)})^2 = \frac{1}{N!^2}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma\tau)\hat{P}(\sigma\tau) = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma'\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma')\hat{P}(\sigma') = \hat{\mathcal{A}}^{(N)}. \tag{3.31}$$

これより $\hat{\mathcal{S}}^{(N)}, \hat{\mathcal{A}}^{(N)}$ で何度射影しても同じ結果となる. □

命題 3.8 (Q21-14(iii)(iv)(v))**.**

射影演算子は Hermite 演算子であり, 積と和について次のようになる.

$$\hat{\mathcal{S}}^{(N)}\hat{\mathcal{A}}^{(N)} = \hat{\mathcal{A}}^{(N)}\hat{\mathcal{S}}^{(N)} = 0 \tag{3.32}$$

$$\begin{cases} \hat{\mathcal{S}}^{(2)} + \hat{\mathcal{A}}^{(2)} = \hat{1}_{\mathcal{H}^{(2)}} \\ \hat{\mathcal{S}}^{(N)} + \hat{\mathcal{A}}^{(N)} \neq \hat{1}_{\mathcal{H}^{(N)}} \qquad (N \geq 3) \end{cases}. \tag{3.33}$$

◇

証明

次に置換演算子の unitary 性より Hermite 演算子となる.

$$(\hat{\mathcal{S}}^{(N)})^\dagger = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\hat{P}(\sigma)^\dagger = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\hat{P}(\sigma^{-1}) = \hat{\mathcal{S}}^{(N)} \tag{3.34}$$

$$(\hat{\mathcal{A}}^{(N)})^\dagger = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma)\hat{P}(\sigma)^\dagger = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma)\hat{P}(\sigma^{-1}) = \hat{\mathcal{A}}^{(N)}. \tag{3.35}$$

演算子 $\hat{\mathcal{S}}^{(N)}, \hat{\mathcal{A}}^{(N)}$ の積について

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{S}}^{(N)}\hat{\mathcal{A}}^{(N)} = \hat{\mathcal{A}}^{(N)}\hat{\mathcal{S}}^{(N)} &= \frac{1}{N!^2}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\tau)\hat{P}(\sigma\tau) && (3.36) \\ &= \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma)\left(\frac{1}{N!}\sum_{\sigma'\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma')\hat{P}(\sigma')\right) && (3.37) \\ &= 0. && (3.38) \end{aligned}$$

より直交することが分かる. また演算子 $\hat{\mathcal{S}}^{(N)}, \hat{\mathcal{A}}^{(N)}$ の和について

$$\hat{\mathcal{S}}^{(2)} + \hat{\mathcal{A}}^{(2)} = \frac{1}{2!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_2}\Big(\hat{P}(\sigma) + \mathrm{sgn}(\sigma)\hat{P}(\sigma)\Big) = 1_{\mathcal{H}^{(2)}} \tag{3.39}$$

$$\hat{\mathcal{S}}^{(N)} + \hat{\mathcal{A}}^{(N)} = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\Big(\hat{P}(\sigma) + \mathrm{sgn}(\sigma)\hat{P}(\sigma)\Big) \neq \hat{1}_{\mathcal{H}^{(N)}} \qquad (N \geq 3). \tag{3.40}$$

とわかる. □

定理 3.9 (Q21-15(i)(ii))**.**

$1 \leq \mu < \nu \leq N$ において $|\psi_\mu\rangle$ と $|\psi_\nu\rangle$ が線形従属であるならば $\hat{A}^{(N)}|\psi_1\rangle\cdots|\psi_N\rangle = 0$ となる. ◇

証明

任意の $\sigma \in \mathfrak{S}_n$ に対して $\tau(\mu) = \sigma(\nu)$, $\tau(\nu) = \sigma(\mu)$ であり, その他の元 $1 \leq i \leq N$ で $\tau(i) = \sigma(i)$ となる τ が一意に取れる. τ は σ に対して符号が反転し, $\hat{P}(\sigma)|\Psi\rangle = \hat{P}(\tau)|\Psi\rangle$ となる. よって $\hat{A}^{(N)}|\psi_1\rangle\cdots|\psi_N\rangle = 0$ となる. □

補題 3.10.

Hilbert 空間に演算子 $\hat{\mathcal{S}}^{(N)}, \hat{\mathcal{A}}^{(N)}$ を作用させるとそれぞれの部分空間となる.

$$\mathcal{H}_S^{(N)} = \hat{\mathcal{S}}^{(N)}\mathcal{H}^{(N)} \tag{3.41}$$

$$\mathcal{H}_A^{(N)} = \hat{\mathcal{A}}^{(N)}\mathcal{H}^{(N)} \tag{3.42}$$

◇

証明

$\hat{\mathcal{S}}^{(N)},\hat{\mathcal{A}}^{(N)}$ は $\mathcal{H}_S^{(N)},\mathcal{H}_A^{(N)}$ への射影演算子であるから $\mathcal{H}_S^{(N)}\supseteq\hat{\mathcal{S}}^{(N)}\mathcal{H}^{(N)},\mathcal{H}_A^{(N)}\supseteq\hat{\mathcal{A}}^{(N)}\mathcal{H}^{(N)}$ は成り立つ. また $|\Psi_S\rangle\in\mathcal{H}_S^{(N)},|\Psi_A\rangle\in\mathcal{H}_A^{(N)}$ について次が成り立つことが分かる.

$$|\Psi_S\rangle=\hat{P}(\sigma)|\Psi_S\rangle=\frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_n}\hat{P}(\sigma)|\Psi_S\rangle=\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\Psi_S\rangle \tag{3.43}$$

$$|\Psi_A\rangle=\mathrm{sgn}(\sigma)\hat{P}(\sigma)|\Psi_A\rangle=\frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_n}\mathrm{sgn}(\sigma)\hat{P}(\sigma)|\Psi_A\rangle=\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\Psi_A\rangle \tag{3.44}$$

これより $\mathcal{H}_S^{(N)}\subseteq\hat{\mathcal{S}}^{(N)}\mathcal{H}^{(N)},\mathcal{H}_A^{(N)}\subseteq\hat{\mathcal{A}}^{(N)}\mathcal{H}^{(N)}$ は成り立つ. よってそれぞれ等しいことが分かる. □

命題 3.11 (Q21-16(i)(ii), Q21-17(i)(ii), Q21-18(i)(ii))**.**

$\mathcal{H}_{single}$ の完全正規直交系を添字集合 I を用いて $\{|\phi_i\rangle\}_{i\in I}$ とする.

$$\mathcal{H}_S^{(N)}=\mathrm{span}\Big\{\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\mid(i_1,\ldots,i_N)\in I_S^{(N)}\Big\} \tag{3.45}$$

$$\mathcal{H}_A^{(N)}=\mathrm{span}\Big\{\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\mid(i_1,\ldots,i_N)\in I_A^{(N)}\Big\} \tag{3.46}$$

ただし添字集合 $I_S^{(N)},I_A^{(N)}$ は次のように定義される.

$$I_S^{(N)}=\{(i_1,\ldots,i_N)\mid i_1,\ldots,i_N\in I\wedge i_1\leq\cdots\leq i_N\} \tag{3.47}$$

$$I_A^{(N)}=\{(i_1,\ldots,i_N)\mid i_1,\ldots,i_N\in I\wedge i_1<\cdots<i_N\} \tag{3.48}$$

◇

証明

完全対称化演算子は置換に対して不変であり, 準同型である為に次のように変形できる.

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{S}}^{(N)}\mathcal{H}^{(N)}&=\hat{\mathcal{S}}^{(N)}\,\mathrm{span}\Big\{|\psi_1\rangle\cdots|\psi_N\rangle\mid|\psi_1\rangle\cdots|\psi_N\rangle\in\mathcal{H}^{(N)}\Big\} &(3.49)\\
&=\mathrm{span}\Big\{\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\psi_1\rangle\cdots|\psi_N\rangle\mid|\psi_1\rangle\cdots|\psi_N\rangle\in\mathcal{H}^{(N)}\Big\} &(3.50)\\
&=\hat{\mathcal{S}}^{(N)}\,\mathrm{span}\{|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\mid i_1,\ldots,i_N\in I\} &(3.51)\\
&=\mathrm{span}\Big\{\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\mid i_1,\ldots,i_N\in I\Big\} &(3.52)\\
&=\mathrm{span}\Big\{\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\mid(i_1,\ldots,i_N)\in I_S^{(N)}\Big\} &(3.53)
\end{aligned}$$

同様に完全反対称についても同じ 1 粒子状態があると 0 となるから次のように変形できる.

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{A}}^{(N)}\mathcal{H}^{(N)}&=\hat{\mathcal{A}}^{(N)}\,\mathrm{span}\Big\{|\psi_1\rangle\cdots|\psi_N\rangle\mid|\psi_1\rangle\cdots|\psi_N\rangle\in\mathcal{H}^{(N)}\Big\} &(3.54)\\
&=\mathrm{span}\Big\{\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\psi_1\rangle\cdots|\psi_N\rangle\mid|\psi_1\rangle\cdots|\psi_N\rangle\in\mathcal{H}^{(N)}\Big\} &(3.55)\\
&=\hat{\mathcal{A}}^{(N)}\,\mathrm{span}\{|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\mid i_1,\ldots,i_N\in I\} &(3.56)\\
&=\mathrm{span}\Big\{\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\mid i_1,\ldots,i_N\in I\Big\} &(3.57)\\
&=\mathrm{span}\Big\{\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\mid(i_1,\ldots,i_N)\in I_A^{(N)}\Big\} &(3.58)
\end{aligned}$$

これらに対して補題 3.10 を適用して示される. □

定義 3.12 (完全対称, 完全反対称な状態の基底とその粒子数)**.**
Hilbert 空間 $\mathcal{H}_S^{(N)}$ の基底状態 $\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \quad (i_1,\ldots,i_N)\in I_S^{(N)}$ を規格化した状態を $|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S$ と定義する. 同様に Hilbert 空間 $\mathcal{H}_A^{(N)}$ の基底状態 $\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \quad (i_1,\ldots,i_N)\in I_A^{(N)}$ を規格化した状態を $|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A$ と定義する. またこれらの状態の粒子数 $n_i\in\mathbb{Z}_{\geq 0}$ を i と等しい i_μ の個数と定義する. これは占有数ともいう.

定理 3.13 (Q21-19(i), Q21-20(i)(ii)(iii))**.**
完全対称な粒子基底 $|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S$ は粒子数 n_i を用いて次のように表現できる.

$$|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S=\sqrt{\frac{N!}{\prod_{i\in I}n_i!}}\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle=\frac{1}{\sqrt{N!\prod_{i\in I}n_i!}}\operatorname{per}\left[|\phi_{i_1}\rangle\quad\cdots\quad|\phi_{i_N}\rangle\right]. \tag{3.59}$$

◇

証明
まず $\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle$ のノルムを計算すると次のようになる.

$$\begin{aligned}
\left\|\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\right\| &= \sqrt{\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}|\hat{\mathcal{S}}^{(N)\dagger}\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle} &(3.60)\\
&=\frac{1}{N!}\sqrt{\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}|\hat{P}(\tau)^\dagger\hat{P}(\sigma)|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle} &(3.61)\\
&=\frac{1}{N!}\sqrt{\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\left\langle\phi_{\tau^{-1}(i_1)}\right|\cdots\left\langle\phi_{\tau^{-1}(i_N)}\right\|\phi_{\sigma^{-1}(i_1)}\left.\right\rangle\cdots\left|\phi_{\sigma^{-1}(i_N)}\right\rangle} &(3.62)\\
&=\sqrt{\frac{\prod_{i\in I}n_i!}{N!}}. &(3.63)
\end{aligned}$$

これより基底状態は次のように書ける.

$$|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S=\sqrt{\frac{N!}{\prod_{i\in I}n_i!}}\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle. \tag{3.64}$$

さらに変形を進めると次のようになる.

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle &= \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\hat{P}(\sigma)|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle &(3.65)\\
&=\frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\left|\phi_{\sigma^{-1}(i_1)}\right\rangle\cdots\left|\phi_{\sigma^{-1}(i_N)}\right\rangle &(3.66)\\
&=\frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\left|\phi_{i_{\sigma(1)}}\right\rangle\cdots\left|\phi_{i_{\sigma(N)}}\right\rangle &(3.67)\\
&=\frac{\prod_{i\in I}n_i!}{N!}\sum_{(i_1,\ldots,i_N)\sim(i'_1,\ldots,i'_N)}\left|\phi_{i'_1}\right\rangle\cdots\left|\phi_{i'_N}\right\rangle &(3.68)\\
&=\frac{1}{N!}\operatorname{per}\begin{bmatrix}|\phi_{i_1}\rangle^{(1)} & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle^{(1)}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ |\phi_{i_1}\rangle^{(N)} & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle^{(N)}\end{bmatrix} &(3.69)\\
&=\frac{1}{N!}\operatorname{per}\left[|\phi_{i_1}\rangle\quad\cdots\quad|\phi_{i_N}\rangle\right]. &(3.70)
\end{aligned}$$

よって次のようになる.

$$|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{N!\prod_{i\in I} n_i!}}\,\mathrm{per}\begin{bmatrix}|\phi_{i_1}\rangle & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle\end{bmatrix}. \tag{3.71}$$

□

命題 3.14 (Q21-20(iv)(v)(vi)).
粒子状態 $|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S$ は $\mathcal{H}_S^{(N)}$ の完全正規直交系となる. ◇

証明
まず正規直交関係については次のように計算できる.

$$\begin{aligned}
\langle\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}|\phi_{i'_1}\cdots\phi_{i'_N}\rangle_S &= \frac{N!^{-1}}{\sqrt{\prod_{i\in I} n_i! n'_i!}}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}|\hat{P}(\sigma^{-1}\tau)|\phi_{i'_1}\rangle\cdots|\phi_{i'_N}\rangle && (3.72)\\
&= \frac{1}{\sqrt{\prod_{i\in I} n_i! n'_i!}}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}|\hat{P}(\sigma)|\phi_{i'_1}\rangle\cdots|\phi_{i'_N}\rangle && (3.73)\\
&= \delta_{i_1 i'_1}\cdots\delta_{i_N i'_N}. && (3.74)
\end{aligned}$$

次に完全性については係数を取り除いて次のように計算できる.

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_S^{(N)} &= \mathrm{span}\Big\{\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \mid (i_1,\ldots,i_N)\in I_S^{(N)}\Big\} && (3.75)\\
&= \mathrm{span}\Big\{\Big|\phi_{i'_1}\cdots\phi_{i'_N}\Big\rangle_S \mid (i_1,\ldots,i_N)\in I_S^{(N)}\Big\}. && (3.76)
\end{aligned}$$

そして完備性については次のように計算できる.

$$\begin{aligned}
&\sum_{(i_1,\ldots,i_N)\in I_S^{(N)}}|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S\langle\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}|_S && (3.77)\\
&= \sum_{(i_1,\ldots,i_N)\in I_S^{(N)}}\frac{1}{N!\prod_{i\in I} n_i!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\hat{P}(\sigma)|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}|\hat{P}^\dagger(\tau) && (3.78)\\
&= \sum_{(i_1,\ldots,i_N)\in I_S^{(N)}}\frac{1}{\prod_{i\in I} n_i!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\hat{P}(\sigma)|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}| && (3.79)\\
&= \sum_{(i_1,\ldots,i_N)\in I_S^{(N)}}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}| && (3.80)\\
&= \hat{1}_{\mathcal{H}_S^{(N)}}. && (3.81)
\end{aligned}$$

よって $|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S$ は完全正規直交系となる. □

定理 3.15 (Q21-19(ii), Q21-21(i)(ii)).
完全反対称な粒子基底 $|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A$ は粒子数 n_i を用いて次のように表現できる.

$$|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A = \sqrt{N!}\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\det\begin{bmatrix}|\phi_{i_1}\rangle & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle\end{bmatrix}. \tag{3.82}$$

◇

証明

まず $\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle$ のノルムを計算すると次のようになる.

$$\begin{aligned}\left\|\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\right\| &= \sqrt{\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}|\hat{\mathcal{A}}^{(N)\dagger}\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle} && (3.83)\\ &= \frac{1}{N!}\sqrt{\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\operatorname{sgn}(\tau\sigma)\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}|\hat{P}(\tau)^\dagger\hat{P}(\sigma)|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle} && (3.84)\\ &= \frac{1}{N!}\sqrt{\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\operatorname{sgn}(\sigma^2)} && (3.85)\\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}}. && (3.86)\end{aligned}$$

これより基底状態は次のように書ける.

$$|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A = \sqrt{N!}\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle. \tag{3.87}$$

さらに変形を進めると次のようになる.

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle &= \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\operatorname{sgn}(\sigma)\hat{P}(\sigma)|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle && (3.88)\\ &= \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\operatorname{sgn}(\sigma)\left|\phi_{\sigma^{-1}(i_1)}\right\rangle\cdots\left|\phi_{\sigma^{-1}(i_N)}\right\rangle && (3.89)\\ &= \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\operatorname{sgn}(\sigma)\left|\phi_{i_{\sigma(1)}}\right\rangle\cdots\left|\phi_{i_{\sigma(N)}}\right\rangle && (3.90)\\ &= \frac{1}{N!}\det\begin{bmatrix}|\phi_{i_1}\rangle^{(1)} & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle^{(1)}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ |\phi_{i_1}\rangle^{(N)} & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle^{(N)}\end{bmatrix} && (3.91)\\ &= \frac{1}{N!}\det\begin{bmatrix}|\phi_{i_1}\rangle & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle\end{bmatrix}. && (3.92)\end{aligned}$$

よって次のようになる.

$$|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}}\det\begin{bmatrix}|\phi_{i_1}\rangle & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle\end{bmatrix}. \tag{3.93}$$

□

命題 3.16 (Q21-21(iii)(iv)(v))**.**
粒子状態 $|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A$ は $\mathcal{H}_A^{(N)}$ の完全正規直交系となる. ◇

証明

まず正規直交関係については次のように計算できる.

$$\begin{aligned}\langle\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}|\phi_{i'_1}\cdots\phi_{i'_N}\rangle_A &= \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\operatorname{sgn}(\sigma^{-1}\tau)\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}|\hat{P}(\sigma^{-1}\tau)|\phi_{i'_1}\rangle\cdots|\phi_{i'_N}\rangle && (3.94)\\ &= \sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\operatorname{sgn}(\sigma)\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}|\hat{P}(\sigma)|\phi_{i'_1}\rangle\cdots|\phi_{i'_N}\rangle && (3.95)\\ &= \delta_{i_1i'_1}\cdots\delta_{i_Ni'_N}. && (3.96)\end{aligned}$$

次に完全性については係数を取り除いて次のように計算できる.

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_A^{(N)} &= \operatorname{span}\left\{\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \mid (i_1,\ldots,i_N)\in I_A^{(N)}\right\} && (3.97)\\ &= \operatorname{span}\left\{\left|\phi_{i'_1}\cdots\phi_{i'_N}\right\rangle_A \mid (i_1,\ldots,i_N)\in I_A^{(N)}\right\}. && (3.98)\end{aligned}$$

最後に完備性については次のように計算できる.

$$
\begin{aligned}
&\sum_{(i_1,\ldots,i_N)\in I_A^{(N)}} |\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A\langle\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}|_A && (3.99)\\
&= \sum_{(i_1,\ldots,i_N)\in I_A^{(N)}} \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N} \mathrm{sgn}(\sigma\tau)\hat{P}(\sigma)|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}|\hat{P}^\dagger(\tau) && (3.100)\\
&= \sum_{(i_1,\ldots,i_N)\in I_A^{(N)}} \sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N} \mathrm{sgn}(\sigma)\hat{P}(\sigma)|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}| && (3.101)\\
&= \sum_{(i_1,\ldots,i_N)\in I_A^{(N)}} |\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}| && (3.102)\\
&= \hat{1}_{\mathcal{H}_A^{(N)}}. && (3.103)
\end{aligned}
$$

よって $|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A$ は $\mathcal{H}_A^{(N)}$ の完全正規直交系となる. □

命題 3.17 (Q21-22(i)(ii)(iii)(iv), Q21-23(i)(ii)(iii)(iv))**.**

完全正規直交系 $|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S, |\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A$ についてそれぞれ完全対称性, 完全反対称性が成り立ち, どちらも線形性が成り立つ.

$$
\begin{aligned}
\left|\phi_{i_{\sigma(1)}}\cdots\phi_{i_{\sigma(N)}}\right\rangle_S &= |\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S && (3.104)\\
\left|\phi_{i_{\sigma(1)}}\cdots\phi_{i_{\sigma(N)}}\right\rangle_A &= \mathrm{sgn}(\sigma)|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A && (3.105)\\
\left|\phi_{i_1}\cdots a^{(0)}\phi_{i_\mu}^{(0)}+a^{(1)}\phi_{i_\mu}^{(1)}\cdots\phi_{i_N}\right\rangle_S &= a^{(0)}\left|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_\mu}^{(0)}\cdots\phi_{i_N}\right\rangle_S + a^{(1)}\left|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_\mu}^{(1)}\cdots\phi_{i_N}\right\rangle_S && (3.106)\\
\left|\phi_{i_1}\cdots a^{(0)}\phi_{i_\mu}^{(0)}+a^{(1)}\phi_{i_\mu}^{(1)}\cdots\phi_{i_N}\right\rangle_A &= a^{(0)}\left|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_\mu}^{(0)}\cdots\phi_{i_N}\right\rangle_A + a^{(1)}\left|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_\mu}^{(1)}\cdots\phi_{i_N}\right\rangle_A. && (3.107)
\end{aligned}
$$

◇

証明

行列に関する性質より次のようになる.

$$
\begin{aligned}
\left|\phi_{i_{\sigma(1)}}\cdots\phi_{i_{\sigma(N)}}\right\rangle_S &= \frac{1}{\sqrt{N!\prod_{i\in I}n_i!}}\,\mathrm{per}\left[\left|\phi_{i_{\sigma(1)}}\right\rangle \quad \cdots \quad \left|\phi_{i_{\sigma(N)}}\right\rangle\right] && (3.108)\\
&= \frac{1}{\sqrt{N!\prod_{i\in I}n_i!}}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\left|\phi_{i_{\sigma\tau(1)}}\right\rangle\cdots\left|\phi_{i_{\sigma\tau(N)}}\right\rangle && (3.109)\\
&= \frac{1}{\sqrt{N!\prod_{i\in I}n_i!}}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\left|\phi_{i_{\tau(1)}}\right\rangle\cdots\left|\phi_{i_{\tau(N)}}\right\rangle && (3.110)\\
&= \frac{1}{\sqrt{N!\prod_{i\in I}n_i!}}\,\mathrm{per}\left[|\phi_{i_1}\rangle \quad \cdots \quad |\phi_{i_N}\rangle\right] && (3.111)\\
&= |\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S. && (3.112)
\end{aligned}
$$

$$\left|\phi_{i_{\sigma(1)}}\cdots\phi_{i_{\sigma(N)}}\right\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}}\det\left[\left|\phi_{i_{\sigma(1)}}\right\rangle \quad \cdots \quad \left|\phi_{i_{\sigma(N)}}\right\rangle\right] \tag{3.113}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\operatorname{sgn}(\tau)\left|\phi_{i_{\sigma\tau(1)}}\right\rangle\cdots\left|\phi_{i_{\sigma\tau(N)}}\right\rangle \tag{3.114}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\operatorname{sgn}(\sigma)\operatorname{sgn}(\tau)\left|\phi_{i_{\tau(1)}}\right\rangle\cdots\left|\phi_{i_{\tau(N)}}\right\rangle \tag{3.115}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}}\operatorname{sgn}(\sigma)\det\left[|\phi_{i_1}\rangle \quad \cdots \quad |\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{3.116}$$

$$= \operatorname{sgn}(\sigma)|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A. \tag{3.117}$$

次に線形性について順当に計算する.

$$\left|\phi_{i_1}\cdots a^{(0)}\phi^{(0)}_{i_\mu} + a^{(1)}\phi^{(1)}_{i_\mu}\cdots\phi_{i_N}\right\rangle_S \tag{3.118}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!\prod_{i\in I} n_i!}}\operatorname{per}\left[|\phi_{i_1}\rangle \quad \cdots \quad a^{(0)}\left|\phi^{(0)}_{i_\mu}\right\rangle + a^{(1)}\left|\phi^{(1)}_{i_\mu}\right\rangle \quad \cdots \quad |\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{3.119}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!\prod_{i\in I} n_i!}}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\left|\phi_{i_{\sigma(1)}}\right\rangle\cdots\left(a^{(0)}\left|\phi^{(0)}_{i_\mu}\right\rangle + a^{(1)}\left|\phi^{(1)}_{i_\mu}\right\rangle\right)\cdots\left|\phi_{i_{\sigma(N)}}\right\rangle \tag{3.120}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!\prod_{i\in I} n_i!}}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\left(a^{(0)}\left|\phi_{i_{\sigma(1)}}\right\rangle\cdots\left|\phi^{(0)}_{i_\mu}\right\rangle\cdots\left|\phi_{i_{\sigma(N)}}\right\rangle + a^{(1)}\left|\phi_{i_{\sigma(1)}}\right\rangle\cdots\left|\phi^{(1)}_{i_\mu}\right\rangle\cdots\left|\phi_{i_{\sigma(N)}}\right\rangle\right) \tag{3.121}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!\prod_{i\in I} n_i!}}\left(a^{(0)}\operatorname{per}\left[|\phi_{i_1}\rangle\cdots\left|\phi^{(0)}_{i_\mu}\right\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\right] + a^{(1)}\operatorname{per}\left[|\phi_{i_1}\rangle\cdots\left|\phi^{(1)}_{i_\mu}\right\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\right]\right) \tag{3.122}$$

$$= a^{(0)}\left|\phi_{i_1}\cdots\phi^{(0)}_{i_\mu}\cdots\phi_{i_N}\right\rangle_S + a^{(1)}\left|\phi_{i_1}\cdots\phi^{(1)}_{i_\mu}\cdots\phi_{i_N}\right\rangle_S. \tag{3.123}$$

$$\left|\phi_{i_1}\cdots a^{(0)}\phi^{(0)}_{i_\mu} + a^{(1)}\phi^{(1)}_{i_\mu}\cdots\phi_{i_N}\right\rangle_A \tag{3.124}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}}\det\left[|\phi_{i_1}\rangle \quad \cdots \quad a^{(0)}\left|\phi^{(0)}_{i_\mu}\right\rangle + a^{(1)}\left|\phi^{(1)}_{i_\mu}\right\rangle \quad \cdots \quad |\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{3.125}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\operatorname{sgn}(\sigma)\left|\phi_{i_{\sigma(1)}}\right\rangle\cdots\left(a^{(0)}\left|\phi^{(0)}_{i_\mu}\right\rangle + a^{(1)}\left|\phi^{(1)}_{i_\mu}\right\rangle\right)\cdots\left|\phi_{i_{\sigma(N)}}\right\rangle \tag{3.126}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\operatorname{sgn}(\sigma)\left(a^{(0)}\left|\phi_{i_{\sigma(1)}}\right\rangle\cdots\left|\phi^{(0)}_{i_\mu}\right\rangle\cdots\left|\phi_{i_{\sigma(N)}}\right\rangle + a^{(1)}\left|\phi_{i_{\sigma(1)}}\right\rangle\cdots\left|\phi^{(1)}_{i_\mu}\right\rangle\cdots\left|\phi_{i_{\sigma(N)}}\right\rangle\right) \tag{3.127}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}}\left(a^{(0)}\det\left[|\phi_{i_1}\rangle\cdots\left|\phi^{(0)}_{i_\mu}\right\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\right] + a^{(1)}\det\left[|\phi_{i_1}\rangle\cdots\left|\phi^{(1)}_{i_\mu}\right\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\right]\right) \tag{3.128}$$

$$= a^{(0)}\left|\phi_{i_1}\cdots\phi^{(0)}_{i_\mu}\cdots\phi_{i_N}\right\rangle_A + a^{(1)}\left|\phi_{i_1}\cdots\phi^{(1)}_{i_\mu}\cdots\phi_{i_N}\right\rangle_A. \tag{3.129}$$

よって成り立つ. □

4 複数の同一粒子からなる量子系の状態に対する対称化の要請

定義 4.1 (スピン統計定理)**.**
N 個の同一の Bose 粒子による Hilbert 空間は完全対称な Hilbert 空間 $\mathcal{H}_S^{(N)}$, また Fermi 粒子による Hilbert 空間は完全反対称な Hilbert 空間 $\mathcal{H}_A^{(N)}$ となる. また全粒子数を固定しない Bose, Fermi 粒子系の Hilbert 空間を $\mathcal{H}_{Bose}, \mathcal{H}_{Fermi}$ と書き, 次のように定義する.

$$\mathcal{H}_{Bose} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_S^{(N)} \tag{4.1}$$

$$\mathcal{H}_{Fermi} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_A^{(N)} \tag{4.2}$$

特に断りのない限り, 随伴関手は省略するものとする.

5 計算練習

例 5.1 (Q21-25, Q21-26, Q21-27)**.**
互いに異なる 1 粒子状態 $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}_{single}$ を持つ Hilbert 空間において 2, 3 個の同一の Bose 粒子, Fermi 粒子の Hilbert 空間は次のようになる. 互いに異なる 3 つの 1 粒子状態 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle \in \mathcal{H}_{single}$ を

Bose, Fermi	$\mathcal{H}_{single}$ の基底	全粒子数 N	$\mathcal{H}_S^{(N)}, \mathcal{H}_A^{(N)}$ の基底
Bose	$\|\alpha\rangle$	1	$\|\alpha\rangle$
Bose	$\|\alpha\rangle, \|\beta\rangle$	1	$\|\alpha\rangle, \|\beta\rangle$
Bose	$\|\alpha\rangle$	2	$\|\alpha\rangle\|\alpha\rangle$
Bose	$\|\alpha\rangle, \|\beta\rangle$	2	$\|\alpha\rangle\|\alpha\rangle, \|\beta\rangle\|\beta\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(\|\alpha\rangle\|\beta\rangle + \|\beta\rangle\|\alpha\rangle)$
Bose	$\|\alpha\rangle$	3	$\|\alpha\rangle\|\alpha\rangle\|\alpha\rangle$
Bose	$\|\alpha\rangle, \|\beta\rangle$	3	$\|\alpha\rangle\|\alpha\rangle\|\alpha\rangle, \|\beta\rangle\|\beta\rangle\|\beta\rangle,$ $\frac{1}{\sqrt{3}}(\|\alpha\rangle\|\alpha\rangle\|\beta\rangle + \|\alpha\rangle\|\beta\rangle\|\alpha\rangle + \|\beta\rangle\|\alpha\rangle\|\alpha\rangle),$ $\frac{1}{\sqrt{3}}(\|\alpha\rangle\|\beta\rangle\|\beta\rangle + \|\beta\rangle\|\alpha\rangle\|\beta\rangle + \|\beta\rangle\|\beta\rangle\|\alpha\rangle)$
Fermi	$\|\alpha\rangle$	1	なし
Fermi	$\|\alpha\rangle, \|\beta\rangle$	1	なし
Fermi	$\|\alpha\rangle$	2	なし
Fermi	$\|\alpha\rangle, \|\beta\rangle$	2	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\alpha\rangle\|\beta\rangle - \|\beta\rangle\|\alpha\rangle)$
Fermi	$\|\alpha\rangle$	3	なし
Fermi	$\|\alpha\rangle, \|\beta\rangle$	3	なし

表 2 Bose, Fermi 粒子系の基底

持つ場合においてそれぞれ 1 つずつある全系の状態は次のようになる.

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle|\gamma\rangle + |\gamma\rangle|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\gamma\rangle|\alpha\rangle + |\gamma\rangle|\beta\rangle|\alpha\rangle + |\alpha\rangle|\gamma\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle|\gamma\rangle) \in \mathcal{H}_S^{(3)} \tag{5.1}$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle|\gamma\rangle + |\gamma\rangle|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\gamma\rangle|\alpha\rangle - |\gamma\rangle|\beta\rangle|\alpha\rangle - |\alpha\rangle|\gamma\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle|\gamma\rangle) \in \mathcal{H}_A^{(3)} \tag{5.2}$$

◇

6 Bose, Fermi 粒子系の量子状態の粒子数表示

定義 6.1 (Bose, Fermi 粒子系の量子状態の粒子数表示)**.**
Bose, Fermi 粒子系の粒子状態は粒子数 n_i を用いて次のように表現できる.

$$|(n_i)_{i\in I}\rangle_S = |n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots\rangle_S = |\underbrace{\phi_1\phi_1\cdots\phi_1}_{n_1}\underbrace{\phi_2\phi_2\cdots\phi_2}_{n_2}\cdots\underbrace{\phi_i\phi_i\cdots\phi_i}_{n_i}\cdots\rangle_S \tag{6.1}$$

$$|(n_i)_{i\in I}\rangle_A = |n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots\rangle_A = |\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A. \tag{6.2}$$

これを粒子数表示または占有数表示という.

粒子状態 $|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S, |\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A$ の粒子数をそれぞれ $n_i^{(s)}, n_i^{(a)}$ とおくと次のような性質を満たす.

$$n_i^{(s)} \in \mathbb{Z}_{\geq 0}, \qquad \sum_{i\in I} n_i^{(s)} = N \tag{6.3}$$

$$n_i^{(a)} \in \{0,1\}, \quad \sum_{i\in I} n_i^{(a)} = N. \tag{6.4}$$

命題 6.2.
Bose, Fermi 粒子系の粒子数表示は well-defined である. ◇

証明
Bose, Fermi 粒子系の完全正規直交系は次のようにラベル付けされていた.

$$|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S \qquad (i_1, \ldots, i_N \in I, i_1 \leq \cdots \leq i_N) \tag{6.5}$$

$$|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A \qquad (i_1, \ldots, i_N \in I, i_1 < \cdots < i_N). \tag{6.6}$$

これらの完全正規直交系はどちらも昇順にソートされているのである粒子数表示に対して完全正規直交系は一意に存在する.

$$|(n_i)_{i\in I}\rangle_S \qquad \left(n_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}, \sum_{i\in I} n_i = N\right) \tag{6.7}$$

$$|(n_i)_{i\in I}\rangle_A \qquad \left(n_i \in \{0,1\}, \sum_{i\in I} n_i = N\right) \tag{6.8}$$

逆に完全正規直交系に対して条件を満たすような粒子数表示は一意に存在する. よって同値な表現であることがわかる. □

定理 6.3.

Bose, Fermi 粒子系の粒子数表示 $\{|(n_i)_{i\in I}\rangle_S \mid n_i \in \mathbb{Z}_{\leq 0}\}, \{|(n_i)_{i\in I}\rangle_A \mid n_i \in \{0,1\}\}$ は完全正規直交系となる. $\diamond$

証明

まず全粒子数 N の Hilbert 空間 $\mathcal{H}_S^{(N)}, \mathcal{H}_A^{(N)}$ の粒子数表示について命題 6.2 より粒子数表示と完全正規直交系が対応する. よって命題 3.14, 命題 3.16 より粒子数表示は完全正規直交系となる. これより次の式が成り立つ.

$$\langle (n_i)_{i\in I}|(n_i')_{i\in I}\rangle_S = \prod_{i\in I} \delta_{n_i n_i'} \tag{6.9}$$

$$\langle (n_i)_{i\in I}|(n_i')_{i\in I}\rangle_A = \prod_{i\in I} \delta_{n_i n_i'} \tag{6.10}$$

$$\mathcal{H}_S^{(N)} = \mathrm{span}\left\{|(n_i)_{i\in I}\rangle_S \mid n_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}, \sum_{i\in I} n_i = N\right\} \tag{6.11}$$

$$\mathcal{H}_A^{(N)} = \mathrm{span}\left\{|(n_i)_{i\in I}\rangle_A \mid n_i \in \{0,1\}, \sum_{i\in I} n_i = N\right\} \tag{6.12}$$

$$\sum_{n_i\in\mathbb{Z}_{\geq 0}, \sum_i n_i = N} |(n_i)_{i\in I}\rangle_S \langle (n_i)_{i\in I}|_S = \hat{1}_{\mathcal{H}_S^{(N)}} \tag{6.13}$$

$$\sum_{n_i\in\{0,1\}, \sum_i n_i = N} |(n_i)_{i\in I}\rangle_A \langle (n_i)_{i\in I}|_A = \hat{1}_{\mathcal{H}_A^{(N)}} \tag{6.14}$$

次に全粒子数を固定しない Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{Bose}, \mathcal{H}_{Fermi}$ について考える. まず正規直交関係について Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{Bose}, \mathcal{H}_{Fermi}$ の定義より異なる全粒子数の状態は直交するから次のように計算できる.

$$\langle (n_i)_{i\in I}|(n_i')_{i\in I}\rangle_S = \delta_{NN'} \prod_{i\in I} \delta_{n_i n_i'} = \prod_{i\in I} \delta_{n_i n_i'} \tag{6.15}$$

$$\langle (n_i)_{i\in I}|(n_i')_{i\in I}\rangle_A = \delta_{NN'} \prod_{i\in I} \delta_{n_i n_i'} = \prod_{i\in I} \delta_{n_i n_i'} \tag{6.16}$$

次に空間全体を張ることは定義より自明.

$$\mathrm{span}\{|(n_i)_{i\in I}\rangle_S \mid n_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}\} = \sum_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_S^{(N)} = \mathcal{H}_{Bose} \tag{6.17}$$

$$\mathrm{span}\{|(n_i)_{i\in I}\rangle_A \mid n_i \in \{0,1\}\} = \sum_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_A^{(N)} = \mathcal{H}_{Fermi} \tag{6.18}$$

最後に完備性については次のように計算できる.

$$\sum_{n_i\in\mathbb{Z}_{\geq 0}} |(n_i)_{i\in I}\rangle_S \langle (n_i)_{i\in I}|_S = \sum_{N=0}^{\infty} \hat{1}_{\mathcal{H}_S^{(N)}} = \hat{1}_{\mathcal{H}_{Bose}} \tag{6.19}$$

$$\sum_{n_i\in\{0,1\}} |(n_i)_{i\in I}\rangle_A \langle (n_i')_{i\in I}|_A = \sum_{N=0}^{\infty} \hat{1}_{\mathcal{H}_A^{(N)}} = \hat{1}_{\mathcal{H}_{Fermi}} \tag{6.20}$$

$\square$

7 Bose 粒子系の消滅演算子 $\hat{a}_i$ と生成演算子 $\hat{a}_i^\dagger$

定義 7.1.
Bose 粒子系の消滅演算子 $\hat{a}_i$ と生成演算子 $\hat{a}_i^\dagger$ を次のように定義する.

$$\begin{cases} \hat{a}_i \dfrac{1}{\sqrt{N!}} \operatorname{per}\Big[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\Big] = \dfrac{1}{\sqrt{(N-1)!}} \displaystyle\sum_{\substack{\mu \in X \\ i_\mu = i}} \operatorname{per}\Big[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_{\mu-1}}\rangle \quad |\phi_{i_{\mu+1}}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\Big] \\ \hat{a}_i^\dagger \dfrac{1}{\sqrt{N!}} \operatorname{per}\Big[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\Big] = \dfrac{1}{\sqrt{(N+1)!}} \operatorname{per}\Big[|\phi_i\rangle \quad |\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\Big] \end{cases} \tag{7.1}$$

その上で個数演算子 $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}$ と全粒子数演算子 $\hat{N} = \sum_{i \in I} \hat{n}_i$ と定義する.

定理 7.2 (Q21-35)**.**
Bose 粒子系の消滅, 生成演算子の定義と次は同値である.

$$\begin{cases} \hat{a}_i |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S = \sqrt{n_i} |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_{\mu-1}} \phi_{i_{\mu+1}} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S \\ \hat{a}_i^\dagger |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S = \sqrt{n_i + 1} |\phi_{i_1} \cdots \phi_i \cdots \phi_{i_N}\rangle_S \end{cases} \tag{7.2}$$

◇

証明
Bose 粒子系の粒子数表示は次のように展開できる.

$$|\phi_{i_1}, \ldots, \phi_{i_N}\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{j \in I} n_j!}} \operatorname{per}\Big[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\Big] \tag{7.3}$$

また permutation は置換に対して不変であるので定義と次は同値である.

$$\begin{cases} \hat{a}_i \dfrac{1}{\sqrt{N!}} \operatorname{per}\Big[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\Big] = \dfrac{n_i}{\sqrt{(N-1)!}} \operatorname{per}\Big[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_{\mu-1}}\rangle \quad |\phi_{i_{\mu+1}}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\Big] \\ \hat{a}_i^\dagger \dfrac{1}{\sqrt{N!}} \operatorname{per}\Big[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\Big] = \dfrac{1}{\sqrt{(N+1)!}} \operatorname{per}\Big[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_i\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\Big] \end{cases} \tag{7.4}$$

$$\iff \begin{cases} \hat{a}_i |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S = \dfrac{n_i}{\sqrt{(N-1)! \prod_{j \in I} n_j!}} \operatorname{per}\Big[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_{\mu-1}}\rangle \quad |\phi_{i_{\mu+1}}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\Big] \\ \hat{a}_i^\dagger |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S = \dfrac{1}{\sqrt{(N+1)! \prod_{j \in I} n_j!}} \operatorname{per}\Big[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_i\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\Big] \end{cases} \tag{7.5}$$

$$\iff \begin{cases} \hat{a}_i |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S = \sqrt{n_i} |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_{\mu-1}} \phi_{i_{\mu+1}} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S \\ \hat{a}_i^\dagger |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S = \sqrt{n_i + 1} |\phi_{i_1} \cdots \phi_i \cdots \phi_{i_N}\rangle_S \end{cases} \tag{7.6}$$

よって $\mathcal{H}_S^{(N)}$ の完全正規直交系で表現できる. □

定理 7.3 (Q21-36)**.**
Bose 粒子系の消滅, 生成演算子の定義と次は同値である.

$$\begin{cases} \hat{a}_i |\ldots, n_i, \ldots\rangle = \sqrt{n_i} |\ldots, n_i - 1, \ldots\rangle \\ \hat{a}_i^\dagger |\ldots, n_i, \ldots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |\ldots, n_i + 1, \ldots\rangle \end{cases} \tag{7.7}$$

$\diamond$

証明

定理 7.2 を吟味することで消滅演算子によって添字 i の 1 粒子状態を消滅させ, 生成演算子によって添字 i の 1 粒子状態を生成していることがわかる. よって粒子数表示に直すことで定義と同値となる.

□

命題 7.4 (Q21-37(i)(ii)(iii)(iv)(v)(vi)(vii))**.**

Bose 粒子系における消滅, 生成演算子の交換関係は次のようになる.

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \qquad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0 \tag{7.8}$$

$\diamond$

証明

消滅演算子 $\hat{a}_i$, 生成演算子 $\hat{a}_i^\dagger$ を状態 $|\ldots, n_i, \ldots\rangle \in \mathcal{H}_{Bose}$ に適用すると

$$\hat{a}_i\hat{a}_i^\dagger|\ldots, n_i, \ldots\rangle = \sqrt{n_i+1}\hat{a}_i|\ldots, n_i+1, \ldots\rangle = (n_i+1)|\ldots, n_i, \ldots\rangle \tag{7.9}$$

$$\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle = \sqrt{n_i}\hat{a}_i^\dagger|\ldots, n_i-1, \ldots\rangle = n_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle \tag{7.10}$$

よりそれぞれの交換関係は次のようになる.

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger] = \hat{a}_i\hat{a}_i^\dagger - \hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i = (n_i+1) - n_i = 1 \tag{7.11}$$

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_i] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i^\dagger] = 0 \tag{7.12}$$

異なる添字 i, j についても状態 $|\ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle \in \mathcal{H}_{Bose}$ に適用すると

$$\hat{a}_i\hat{a}_j|\ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle = \sqrt{n_i n_j}|\ldots, n_i-1, \ldots, n_j-1, \ldots\rangle \tag{7.13}$$

$$\hat{a}_i\hat{a}_j^\dagger|\ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle = \sqrt{n_i(n_j+1)}|\ldots, n_i-1, \ldots, n_j+1, \ldots\rangle \tag{7.14}$$

$$\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i|\ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle = \sqrt{n_i(n_j+1)}|\ldots, n_i-1, \ldots, n_j+1, \ldots\rangle \tag{7.15}$$

$$\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_j^\dagger|\ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle = \sqrt{(n_i+1)(n_j+1)}|\ldots, n_i+1, \ldots, n_j+1, \ldots\rangle \tag{7.16}$$

よりそれぞれの交換関係は次のようになる.

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0 \tag{7.17}$$

よって示された. □

命題 7.5 (Q21-38(i)(ii))**.**

Bose 粒子系における消滅, 生成演算子は互いに Hermite 共役である. $\diamond$

証明

次の計算により $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ は互いに Hermite 共役であることがわかる.

$$\langle (n_j)_{j\in I}|\hat{a}_i|(n'_j)_{j\in I}\rangle = \begin{cases} \sqrt{n'_i} & (n_i = n'_i - 1) \\ 0 & (n_i \neq n'_i) \end{cases} \tag{7.18}$$

$$\langle (n'_j)_{j\in I}|\hat{a}_i^\dagger|(n_j)_{j\in I}\rangle = \begin{cases} \sqrt{n_i+1} & (n_i + 1 = n'_i) \\ 0 & (n_i \neq n'_i) \end{cases} \tag{7.19}$$

□

命題 7.6 (Q21-39(i)(ii)(iii)(iv)).

個数演算子 $\hat{n}_i$ と全粒子数演算子 $\hat{N}$ は Hermite 演算子であり, 固有値は $\hat{n}_i = n_i, \hat{N} = N$ となる. ◇

証明

個数演算子 $\hat{n}_i$ は生成消滅演算子に展開することで計算できる.

$$\hat{n}_i^\dagger = (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i)^\dagger = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \hat{n}_i \tag{7.20}$$

$$\hat{n}_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle = n_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle \tag{7.21}$$

全粒子数演算子 $\hat{N}$ は個数演算子に展開することで計算できる.

$$\hat{N}^\dagger = \sum_{i\in I} \hat{n}_i^\dagger = \sum_{i\in I} \hat{n}_i = \hat{N} \tag{7.22}$$

$$\hat{N} = \sum_{i\in I} \hat{n}_i = \sum_{i\in I} n_i = N \tag{7.23}$$

□

ここで粒子が 1 個も存在しないという真空状態を用いて状態を構成することを考える.

$$|\mathrm{vac}\rangle = |0, 0, 0, \ldots\rangle \tag{7.24}$$

定義 7.7.

真空状態 $|\mathrm{vac}\rangle$ を次のように定義する.

$$\begin{cases} \hat{a}_i|\mathrm{vac}\rangle = 0 \qquad (\forall i \in I) \\ \langle \mathrm{vac}|\mathrm{vac}\rangle = 1 \end{cases} \tag{7.25}$$

命題 7.8 (Q21-40(i)(ii)).

このとき次のような性質が認められる.

$$|(n_i)_{i\in I}\rangle = \prod_{i\in I} \frac{(\hat{a}_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}}|\mathrm{vac}\rangle \tag{7.26}$$

◇

証明

それぞれ定義を展開することで導かれる.

$$|(n_i)_{i\in I}\rangle = \prod_{i\in I} \frac{(\hat{a}_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}}|\mathrm{vac}\rangle \tag{7.27}$$

□

定理 7.9 (Q21-41(i)).

Bose 粒子系における消滅演算子 $\hat{a}_i$ と生成演算子 $\hat{a}_i^\dagger$ において次の性質は定義と同値である.

$$(\hat{a}_i)^\dagger = \hat{a}_i^\dagger, \qquad [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \qquad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0, \qquad \hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = n_i \tag{7.28}$$

◇

証明

既に定義から性質を導くことはしているので性質から定義を導く.

$$\hat{n}_i\hat{a}_i = (\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i)\hat{a}_i = (\hat{a}_i\hat{a}_i^\dagger - 1)\hat{a}_i = (n_i - 1)\hat{a}_i \tag{7.29}$$
$$\hat{n}_i\hat{a}_i^\dagger = \hat{a}_i^\dagger(\hat{a}_i\hat{a}_i^\dagger) = \hat{a}_i^\dagger(\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i + 1) = (n_i + 1)\hat{a}_i^\dagger \tag{7.30}$$
$$\hat{n}_j\hat{a}_i = \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j\hat{a}_i = \hat{a}_i\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j = n_j\hat{a}_i \qquad (i \neq j) \tag{7.31}$$
$$\hat{n}_j\hat{a}_i^\dagger = \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j\hat{a}_i^\dagger = \hat{a}_i^\dagger\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j = n_j\hat{a}_i^\dagger \qquad (i \neq j) \tag{7.32}$$

より $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ を適用すると状態の粒子数 n_i が 1 だけ上下する. また $(\hat{a}_i)^\dagger = \hat{a}_i^\dagger$ より

$$\langle \ldots, n_i - 1, \ldots | \hat{a}_i | \ldots, n_i, \ldots \rangle = \langle \ldots, n_i, \ldots | \hat{a}_i^\dagger | \ldots, n_i - 1, \ldots \rangle \tag{7.33}$$
$$n_i = \langle \ldots, n_i, \ldots | \hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i | \ldots, n_i, \ldots \rangle \tag{7.34}$$

であるから次のようになる.

$$\hat{a}_i | \ldots, n_i, \ldots \rangle = \sqrt{n_i} | \ldots, n_i - 1, \ldots \rangle \tag{7.35}$$
$$\hat{a}_i^\dagger | \ldots, n_i, \ldots \rangle = \sqrt{n_i + 1} | \ldots, n_i + 1, \ldots \rangle \tag{7.36}$$

これらの式から定理 7.2 より定義を導ける. □

8 Fermi 粒子系の消滅演算子 $\hat{c}_i$ と生成演算子 $\hat{c}_i^\dagger$

定義 8.1.
Fermi 粒子系の消滅演算子 $\hat{c}_i$ と生成演算子 $\hat{c}_i^\dagger$ を次のように定義する.

$$\hat{c}_i \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{(N-1)!}} \sum_{\substack{\mu \in \mathbb{Z}_N \\ i_\mu = i}} (-1)^\mu \det\left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_{\mu-1}}\rangle \quad |\phi_{i_{\mu+1}}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{8.1}$$
$$\hat{c}_i^\dagger \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{(N+1)!}} \det\left[|\phi_i\rangle \quad |\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{8.2}$$

その上で個数演算子 $\hat{n}_i = \hat{c}_i^\dagger\hat{c}$ と全粒子数演算子 $\hat{N} = \sum_{i\in I}\hat{n}_i$ と定義する.

定理 8.2 (Q21-50)**.**

$$\hat{c}_i|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A = (-1)^\mu n_i|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_{\mu-1}}\phi_{i_{\mu+1}}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A \tag{8.3}$$
$$\hat{c}_i^\dagger|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A = (-1)^\mu|\phi_{i_1}\cdots\phi_i\cdots\phi_{i_N}\rangle_A \tag{8.4}$$

◇

証明

Fermi 粒子系の消滅, 生成演算子の定義は $|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A$ の粒子数 n_i を用いて次のようになる.

$$\hat{c}_i \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\left[|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\right] = \frac{(-1)^\mu}{\sqrt{(N-1)!}} n_i \det\left[|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_{\mu-1}}\rangle|\phi_{i_{\mu+1}}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{8.5}$$

$$\hat{c}_i^\dagger \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\left[|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{(N+1)!}} \det\left[|\phi_i\rangle \quad |\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{8.6}$$

Fermi 粒子系の粒子数表示は次のように展開できる.

$$|n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots\rangle = |\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\left[|\phi_{i_1}\rangle \quad \cdots \quad |\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{8.7}$$

これより定義と次の式は同値である.

$$\hat{c}_i|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A = (-1)^\mu n_i |\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_{\mu-1}}\phi_{i_{\mu+1}}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A \tag{8.8}$$

$$\hat{c}_i^\dagger|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A = |\phi_i\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A \tag{8.9}$$

□

定理 8.3 (Q21-51)**.**

Fermi 粒子系の消滅, 生成演算子を状態に適用すると次のようになる.

$$\hat{c}_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle_A = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} n_i |\ldots, 1-n_i, \ldots\rangle_A \tag{8.10}$$

$$\hat{c}_i^\dagger|\ldots, n_i, \ldots\rangle_A = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} (1-n_i) |\ldots, 1-n_i, \ldots\rangle_A \tag{8.11}$$

◇

証明

□

定理 8.4 (Q21-52(i)(ii)(iii)(iv)(v)(vi)(vii)(viii)(ix)(x)(xi)(xii)(xiii)(xiv)(xv)(xvi)(xvii)(xviii)(xix)(xx))**.**

Fermi 粒子系における消滅演算子 $\hat{c}_i$ と生成演算子 $\hat{c}_i^\dagger$ の反交換関係は次のようになる.

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \qquad \{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = \{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger\} = 0 \tag{8.12}$$

◇

証明

$$\hat{c}_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle_A = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} n_i |\ldots, 0, \ldots\rangle_A \tag{8.13}$$

$$\hat{c}_i^\dagger|\ldots, n_i, \ldots\rangle_A = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} (1-n_i) |\ldots, 1, \ldots\rangle_A \tag{8.14}$$

$$\hat{c}_i\hat{c}_i^\dagger|\ldots, n_i, \ldots\rangle_A = (1-n_i)|\ldots, 0, \ldots\rangle_A \tag{8.15}$$

$$\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle_A = n_i|\ldots, 1, \ldots\rangle_A \tag{8.16}$$

$$\hat{c}_i\hat{c}_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle_A = 0 \tag{8.17}$$

$$\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_i^\dagger|\ldots, n_i, \ldots\rangle_A = 0 \tag{8.18}$$

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_i^\dagger\} = 1, \qquad \{\hat{c}_i, \hat{c}_i\} = \{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_i^\dagger\} = 0 \tag{8.19}$$

添字 i, j が $i < j$ の順となっているとき先に $\hat{c}_i$ が適用されると後置の演算子で粒子数が 1 ずれることを考慮して次のようになる.

$$\hat{c}_i\hat{c}_j^\dagger|\ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle_A = (-1)^{\sum_{k=i}^{j-1} n_k} n_i(1-n_j)|\ldots, 1-n_i, \ldots, 1-n_j, \ldots\rangle_A \tag{8.20}$$
$$\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_i|\ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle_A = (-1)^{1+\sum_{k=i}^{j-1} n_k} n_i(1-n_j)|\ldots, 1-n_i, \ldots, 1-n_j, \ldots\rangle_A \tag{8.21}$$
$$\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j|\ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle_A = (-1)^{\sum_{k=i}^{j-1} n_k} (1-n_i)n_j|\ldots, 1-n_i, \ldots, 1-n_j, \ldots\rangle_A \tag{8.22}$$
$$\hat{c}_j\hat{c}_i^\dagger|\ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle_A = (-1)^{1+\sum_{k=i}^{j-1} n_k} (1-n_i)n_j|\ldots, 1-n_i, \ldots, 1-n_j, \ldots\rangle_A \tag{8.23}$$
$$\hat{c}_i\hat{c}_j|\ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle_A = (-1)^{\sum_{k=i}^{j-1} n_k} n_in_j|\ldots, 1-n_i, \ldots, 1-n_j, \ldots\rangle_A \tag{8.24}$$
$$\hat{c}_j\hat{c}_i|\ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle_A = (-1)^{1+\sum_{k=i}^{j-1} n_k} n_in_j|\ldots, 1-n_i, \ldots, 1-n_j, \ldots\rangle_A \tag{8.25}$$
$$\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j^\dagger|\ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle_A = (-1)^{\sum_{k=i}^{j-1} n_k} (1-n_i)(1-n_j)|\ldots, 1-n_i, \ldots, 1-n_j, \ldots\rangle_A \tag{8.26}$$
$$\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_i^\dagger|\ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle_A = (-1)^{1+\sum_{k=i}^{j-1} n_k} (1-n_i)(1-n_j)|\ldots, 1-n_i, \ldots, 1-n_j, \ldots\rangle_A \tag{8.27}$$

$\{A, B\} = \{B, A\}$ 次の反交換関係が求まる.

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\} = \{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = \{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger\} = 0 \qquad (i \neq j) \tag{8.28}$$

□

命題 8.5 (Q21-53(i)(ii))**.**
Fermi 粒子系における消滅演算子 $\hat{c}_i$ と生成演算子 $\hat{c}_i^\dagger$ は互いに Hermite 共役である. ◇

証明

$$\langle n_1', \ldots, n_i', \ldots|\hat{c}_i^\dagger|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle_A = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j}\langle n_1', \ldots, n_i', \ldots|n_1, \ldots, n_i+1, \ldots\rangle_A \tag{8.29}$$
$$= (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j}\delta_{n_1n_1'}\cdots\delta_{n_{i-1}n_{i-1}'}\delta_{n_i+1n_i'}\delta_{n_{i+1}n_{i+1}'}\cdots \tag{8.30}$$
$$\langle n_1, \ldots, n_i, \ldots|\hat{c}_i|n_1', \ldots, n_i', \ldots\rangle_A = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j'}\langle n_1, \ldots, n_i, \ldots|n_1', \ldots, n_i'-1, \ldots\rangle_A \tag{8.31}$$
$$= (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j'}\delta_{n_1n_1'}\cdots\delta_{n_{i-1}n_{i-1}'}\delta_{n_i+1n_i'}\delta_{n_{i+1}n_{i+1}'}\cdots \tag{8.32}$$

より Hermite 共役である. □

命題 8.6 (Q21-54(i)(ii)(iii)(iv))**.**

$$\hat{n}_i^\dagger = \hat{n}_i, \hat{n}_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle_A = n_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle_A \tag{8.33}$$
$$\hat{N}^\dagger = \hat{N}, \hat{N}|(n_i)_{i\in I}\rangle_A = N|(n_i)_{i\in I}\rangle_A \tag{8.34}$$

◇

証明

$$\hat{n}_i^\dagger = (\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i)^\dagger = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i = \hat{n}_i \tag{8.35}$$

$$\hat{N}^\dagger = \sum_{i\in I} \hat{n}_i^\dagger = \sum_{i\in I} \hat{n}_i = \hat{N} \tag{8.36}$$

$$\hat{n}_i|\ldots,n_i,\ldots\rangle_A = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i|\ldots,n_i,\ldots\rangle_A = (-1)^{2\sum_{j=1}^{i-1} n_j} n_i^2|\ldots,n_i,\ldots\rangle_A = n_i|\ldots,n_i,\ldots\rangle_A \tag{8.37}$$

$$\hat{N}|(n_i)_{i\in I}\rangle_A = \sum_{i\in I} \hat{n}_i|(n_i)_{i\in I}\rangle_A = \sum_{i\in I} n_i|(n_i)_{i\in I}\rangle_A = N|(n_i)_{i\in I}\rangle_A \tag{8.38}$$

□

定義 8.7.
真空状態 $|\mathrm{vac}\rangle$ を次のように定義する.

$$\begin{cases} \hat{c}_i|\mathrm{vac}\rangle = 0 \qquad (i \in I) \\ \langle\mathrm{vac}|\mathrm{vac}\rangle = 1 \end{cases} \tag{8.39}$$

命題 8.8 (Q21-55)**.**

$$|(n_i)_{i\in I}\rangle = \prod_{\mu\in\mathbb{Z}_N} \hat{c}_{i_\mu}|\mathrm{vac}\rangle \tag{8.40}$$

◇

証明

□

9 Bose, Fermi 粒子系の消滅演算子 $\hat{b}_i$ と生成演算子 $\hat{b}_i^\dagger$

前 2 章で行った生成, 消滅演算子を統一する.

定義 9.1.

1 粒子状態の Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{single}$ の完全正規直交系 $(|\phi_i\rangle)_{i\in I}$ に対して完全正規直交系

$$\mathcal{H}_{\mathrm{M.P.}} := \begin{cases} \mathcal{H}_{Bose} & (Bose) \\ \mathcal{H}_{Fermi} & (Fermi) \end{cases} \tag{9.1}$$

$$\hat{b}_i = \begin{cases} \hat{a}_i & (Bose) \\ \hat{c}_i & (Fermi) \end{cases}, \quad \det{}^{(\pm)} = \begin{cases} \mathrm{per} & (+) \\ \det & (-) \end{cases}, \quad [\hat{A}, \hat{B}]_{\mp} = \begin{cases} [\hat{A}, \hat{B}] & (-) \\ \{\hat{A}, \hat{B}\} & (+) \end{cases} \tag{9.2}$$

真空状態 $|\mathrm{vac}\rangle$

$$\begin{cases} \hat{b}_i|\mathrm{vac}\rangle = 0 & (i \in I) \\ \langle\mathrm{vac}|\mathrm{vac}\rangle = 1 \end{cases} \tag{9.3}$$

これより次の定理が成り立つ. 証明は略.

定理 9.2.

$$\hat{b}_i \frac{1}{\sqrt{N!}} \det{}^{(\pm)} \left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{(N-1)!}} \sum_{\substack{\mu\in X \\ i_\mu = i}} (\pm1)^\mu \det{}^{(\pm)} \left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_{\mu-1}}\rangle \quad |\phi_{i_{\mu+1}}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{9.4}$$

$$\hat{b}_i^\dagger \frac{1}{\sqrt{N!}} \det{}^{(\pm)} \left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{(N+1)!}} \det{}^{(\pm)} \left[|\phi_i\rangle \quad |\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{9.5}$$

$$[\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger]_{\mp} = \delta_{ij}, \quad [\hat{b}_i, \hat{b}_j]_{\mp} = [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger]_{\mp} = 0 \tag{9.6}$$

$$\tag{9.7}$$

$$\det{}^{(\pm)} \left[\left|\phi_{i_{\sigma(1)}}\right\rangle \cdots \left|\phi_{i_{\sigma(N)}}\right\rangle\right] = (\pm1)^\sigma \det{}^{(\pm)} \left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{9.8}$$

基底状態

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \det{}^{(\pm)} \left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{9.9}$$

◇

10 演算子の粒子数表示: 1 粒子演算子とその和、2 粒子演算子とその和の導入

現実の粒子系における観測量はある 1 つの相互作用に関して関与する粒子数は 1 個か 2 個しかない. これを 1 粒子演算子, 2 粒子演算子と呼ぶ.

定義 10.1 (n 粒子演算子)**.**
Hilbert 空間 $\mathcal{H}^{(n)}$ において粒子交換に関して対称な演算子を n 粒子演算子と呼ぶ. このとき n 粒子演算子 $\hat{f}$ を Hilbert 空間 $\mathcal{H}^{(N)}$ の粒子 $\mu_1, \dots, \mu_n$ に対して埋め込んだ演算子を $\hat{f}_{\mu_1\cdots\mu_n}$ と書く. そして n 粒子演算子の粒子対に関する和 $\hat{f}^{\mathrm{tot}}$ を次のように定義する.

$$\hat{f}^{\mathrm{tot}} = \sum_{\substack{\mu_1,\dots,\mu_n \in X \\ \mu_1 < \cdots < \mu_n}} \hat{f}_{\mu_1\cdots\mu_n} \tag{10.1}$$

特に量子力学では今のところ 3 粒子以上が相互に作用することはない為に 1 粒子演算子と 2 粒子演算子のみが扱われる. そして $\mathcal{H}^{(N)}$ において明らかに状態が $\{|\phi_i\rangle\}_{i\in I}$ を用いて表現されているならば添字を用いて表示すると定義する.

$$|i_1 \cdots i_N\rangle = |\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \tag{10.2}$$

例 10.2.
例えば Hamiltonian 演算子 $\hat{H}$ は 1 粒子演算子の粒子に関する和 $\hat{h}^{\mathrm{tot}}$ と 2 粒子演算子の粒子対に関する和 $\hat{v}^{\mathrm{tot}}$ で表現できる. 外部から磁場 B をかけた多電子原子を考える。原子番号 Z の多電子原子を考えることにします。原点に電荷 $+Ze$ を持ち無限に重い原子核が位置しているとします。その回りに、N 個のそれぞれが電荷 $-e$ と質量 me を持つ電子が運動しているとします。この原子が中性原子の状態にあるならば $N = Z$ であり、また、自然数 $n = 1, 2, \dots$ に関して n 価の陽イオンの状態にあるならば $N = Z - n$ であります。この N 個の電子という同種粒子からなる物理系を記述する Hamiltonian 演算子 $\hat{H}$ は次のように与えられます. $\hat{H} = \hat{h}^{\mathrm{tot}} + \hat{v}^{\mathrm{tot}}$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e}\sum_{\mu=1}^{N} \hat{\boldsymbol{p}}_\mu^2 - Ze^2 \sum_{\mu=1}^{N} \frac{1}{|\hat{\boldsymbol{r}}_\mu|} + e^2 \sum_{1\le\mu<\nu\le N} \frac{1}{|\hat{\boldsymbol{r}}_\mu - \hat{\boldsymbol{r}}_\nu|} + \frac{e}{2m_e c}(\hat{\boldsymbol{L}} + 2\hat{\boldsymbol{S}})\cdot \boldsymbol{B} + \frac{e^2}{8m_e c^2}\sum_{\mu=1}^{N} (\boldsymbol{B}\times\hat{\boldsymbol{r}}_\mu)^2 \tag{10.3}$$

$$\hat{h}_\mu = \frac{1}{2m_e}\hat{\boldsymbol{p}}_\mu^2 - \frac{Ze^2}{|\hat{\boldsymbol{r}}_\mu|} + \frac{e}{2m_e c}(\hat{\boldsymbol{l}_\mu} + 2\hat{\boldsymbol{s}_\mu})\cdot\boldsymbol{B} + \frac{e^2}{8m_e c^2}(\boldsymbol{B}\times\hat{\boldsymbol{r}}_\mu)^2 \tag{10.4}$$

$$\hat{v}_{\mu\nu} = \frac{e^2}{|\hat{\boldsymbol{r}}_\mu - \hat{\boldsymbol{r}}_\nu|} \tag{10.5}$$

◇

11 n 粒子演算子の和の粒子数表示

Bose, Fermi 粒子系や 1, 2 粒子演算子を分ける理由がよく分からなかったので 1 つにまとめました. これらの章の採点については難しければ 0 点でいいです. 2 粒子演算子において α, β の定義がよろしくないです.

定理 11.1.

n 粒子演算子について次のような性質が認められる.

$$\hat{f}^{\text{tot}} = \hat{P}(\sigma)\hat{f}^{\text{tot}}\hat{P}^{\dagger}(\sigma) \tag{11.1}$$

$$\hat{f}^{\text{tot}} = \frac{1}{n!}\sum_{\substack{\mu_1,\dots,\mu_n\in X\\ \mu_\nu\neq\mu_\xi}}\hat{f}_{\mu_1\cdots\mu_n} \tag{11.2}$$

◇

証明

置換に関して対称な演算子であるから $\mu_1,\dots,\mu_n$ 番目の状態の置換に対して不変であり, その他の添字については置換しても両側で対応を取れているのでこちらも置換に対して不変である.

$$\begin{aligned}
\langle i_1\cdots i_N|\hat{P}(\sigma)\hat{f}^{\text{tot}}\hat{P}^{\dagger}(\sigma)|j_1\cdots j_N\rangle &= \sum_{\substack{\mu_1,\dots,\mu_n\in X\\ \mu_1<\cdots<\mu_n}}\left\langle i_{\sigma(1)}\cdots i_{\sigma(N)}\middle|\hat{f}_{\mu_1\cdots\mu_n}\middle|j_{\sigma(1)}\cdots j_{\sigma(N)}\right\rangle && (11.3)\\
&= \sum_{\substack{\mu_1,\dots,\mu_n\in X\\ \mu_1<\cdots<\mu_n}}\langle i_1\cdots i_N|\hat{f}_{\mu_1\cdots\mu_n}|j_1\cdots j_N\rangle && (11.4)\\
&= \langle i_1\cdots i_N|\hat{f}^{\text{tot}}|j_1\cdots j_N\rangle && (11.5)
\end{aligned}$$

また置換に対して対称であるから次のようにも変形できる.

$$\hat{f}^{\text{tot}} = \sum_{\substack{\mu_1,\dots,\mu_n\in X\\ \mu_1<\cdots<\mu_n}}\hat{f}_{\mu_1\cdots\mu_n} = \frac{1}{n!}\sum_{\substack{\mu_1,\dots,\mu_n\in X\\ \mu_n\neq\mu_{n'}}}\hat{f}_{\mu_1\cdots\mu_n} \tag{11.6}$$

□

例 11.2 (Q21-58, Q21-59, Q21-60)**.**

1 粒子演算子 $\hat{h}$, 2 粒子演算子 $\hat{v}$ についても上の定理が成り立つ.

$$\hat{h} = \hat{P}(\sigma)\hat{h}\hat{P}^{\dagger}(\sigma) \tag{11.7}$$

$$\hat{v} = \hat{P}(\sigma)\hat{v}\hat{P}^{\dagger}(\sigma). \tag{11.8}$$

例えば 2 粒子演算子 $\hat{v}$ について交換演算子で置換すると

$$\langle ji|v|lk\rangle = \langle ji|\hat{E}\hat{v}\hat{E}^{\dagger}|lk\rangle = \langle ij|v|kl\rangle \tag{11.9}$$

となる. ◇

定 理 11.3 (Q21-61(i)(ii)(iii)(iv)(v)(vi)(vii)(viii), Q21-62, Q21-63(i)(ii)(iii), Q21-64(i)(ii)(iii), Q21-65(i)(ii)(iii), Q21-66(i)(ii), Q21-67(i)(ii)(iii)(iv)(v)(vi)(vii)(viii)(ix)(x)(xi)(xii)(xiii)(xiv)(xv)(xvi), Q21-68, Q21-69(i)(ii)(iii)(iv), Q21-70(i)(ii)(iii)(iv)(v)(vi)(vii)(viii), Q21-71(i)(ii)(iii), Q21-72(i)(ii)(iii), Q21-73(i)(ii)(iii), Q21-74(i)(ii),
Q21-75(i)(ii)(iii)(iv)(v)(vi)(vii)(viii)(ix)(x)(xi)(xii)(xiii)(xiv)(xv)(xvi), Q21-76, Q21-77(i)(ii)(iii)(iv))**.**

Bose, Fermi 粒子系の Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{\text{M.P.}}$ において n 粒子演算子 $\hat{f}$ の和 $\hat{f}^{\text{tot}}$ は消滅, 生成演算子 $\hat{b}_i, \hat{b}_i^{\dagger}$ を用いて次のように表現できる.

$$\hat{f}^{\text{tot}} = \sum_{\substack{j_1,\dots,j_n\in I\\ k_1,\dots,k_n\in I}}\langle j_1\cdots j_n|f|k_1\cdots k_n\rangle\hat{b}_{j_1}^{\dagger}\cdots\hat{b}_{j_n}^{\dagger}\hat{b}_{k_1}\cdots\hat{b}_{k_n} \tag{11.10}$$

$\diamond$

証明

n 粒子演算子を適用する

$$\hat{f}^{\mathrm{tot}}\frac{1}{\sqrt{N!}}\det{}^{(\pm)}\Big[|i_1\rangle\cdots|i_N\rangle\Big]=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}(\pm1)^{\sigma}\hat{f}^{\mathrm{tot}}\hat{P}^{\dagger}(\sigma)|i_1\cdots i_N\rangle \tag{11.11}$$

ここで完全性を用いて次のように単位演算子の分解ができる.

$$\sum_{j_1,\ldots,j_n\in I}|j_1\cdots j_n\rangle\langle j_1\cdots j_n|=\hat{1} \tag{11.12}$$

これより $\hat{f}^{\mathrm{tot}}\hat{P}(\sigma)$ は次のように変形できる.

$$\begin{aligned}
&\hat{f}^{\mathrm{tot}}\hat{P}(\sigma)|i_1\cdots i_N\rangle && (11.13)\\
&=\frac{1}{n!}\sum_{\substack{\mu_1,\ldots,\mu_n\in X\\ \mu_\nu\neq\mu_\xi}}\hat{f}_{\mu_1\cdots\mu_n}\Big|i_{\sigma(1)}\cdots i_{\sigma(N)}\Big\rangle && (11.14)\\
&=\frac{1}{n!}\sum_{\substack{\mu_1,\ldots,\mu_n\in X\\ \mu_\nu\neq\mu_\xi}}\sum_{j_1,\ldots,j_n\in I}|j_1\cdots j_n\rangle\langle j_1\cdots j_n|\hat{f}_{\mu_1\cdots\mu_n}\Big|i_{\sigma(1)}\cdots i_{\sigma(N)}\Big\rangle && (11.15)\\
&=\frac{1}{n!}\sum_{\substack{\mu_1,\ldots,\mu_n\in X\\ \mu_\nu\neq\mu_\xi}}\sum_{j_1,\ldots,j_n\in I}\Big|i_{\sigma(1)}\cdots j_1\cdots j_n\cdots i_{\sigma(N)}\Big\rangle\langle j_1\cdots j_n|f\Big|i_{\sigma(\mu_1)}\cdots i_{\sigma(\mu_n)}\Big\rangle && (11.16)\\
&=\frac{1}{n!}\sum_{\substack{j_1,\ldots,j_n\in I\\ k_1,\ldots,k_n\in I}}\langle j_1\cdots j_n|f|k_1\cdots k_n\rangle\sum_{\substack{\mu_1,\ldots,\mu_n\in X\\ \mu_\nu\neq\mu_\xi\\ i_{\sigma(\mu_\nu)}=k_\nu}}|i_{\sigma(1)}\cdots\underbrace{j_1}_{\mu_1}\cdots\underbrace{j_n}_{\mu_n}\cdots i_{\sigma(N)}\rangle && (11.17)\\
&=\frac{1}{n!}\sum_{\substack{j_1,\ldots,j_n\in I\\ k_1,\ldots,k_n\in I}}\langle j_1\cdots j_n|f|k_1\cdots k_n\rangle\sum_{\substack{\mu_1,\ldots,\mu_n\in X\\ \mu_\nu\neq\mu_\xi\\ i_{\sigma(\mu_\nu)}=k_\nu}}\hat{P}(\sigma)|i_1\cdots\underbrace{j_1}_{\sigma(\mu_1)}\cdots\underbrace{j_n}_{\sigma(\mu_n)}\cdots i_N\rangle && (11.18)
\end{aligned}$$

そして総和の変数を $\mu_\nu\to\sigma^{-1}(\alpha_\nu)$ と書き換えて総和の順序を交換することで permutation に変形できる.

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{n!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\sum_{\substack{\mu_1,\ldots,\mu_n\in X\\ \mu_\nu\neq\mu_\xi\\ i_{\sigma(\mu_\nu)}=k_\nu}}(\pm1)^{\sigma}\hat{P}^{\dagger}(\sigma)|i_1\cdots\underbrace{j_\nu}_{\sigma(\mu_\nu)}\cdots i_N\rangle && (11.19)\\
&=\frac{1}{n!}\sum_{\substack{\alpha_1,\ldots,\alpha_n\in X\\ \alpha_\nu\neq\alpha_\xi\\ i_{\alpha_\nu}=k_\nu}}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}(\pm1)^{\sigma}\hat{P}^{\dagger}(\sigma)|i_1\cdots\underbrace{j_\nu}_{\alpha_\nu}\cdots i_N\rangle && (11.20)\\
&=\sum_{\substack{\alpha_1,\ldots,\alpha_n\in X\\ \alpha_1<\cdots<\alpha_n\\ i_{\alpha_\nu}=k_\nu}}\det{}^{(\pm)}[|i_1\rangle\cdots\underbrace{|j_\nu\rangle}_{\alpha_\nu}\cdots|i_N\rangle] && (11.21)
\end{aligned}$$

次に消滅, 生成演算子 $\hat{b}_i,\hat{b}_i^{\dagger}$ の定義を用いてそれぞれ後ろから, 前からの順番で適用していくことで次

のように変形できる.

$$\sum_{\substack{\alpha_1<\cdots<\alpha_n\\ i_{\alpha_\nu}=k_\nu}} \frac{1}{\sqrt{N!}} \det{}^{(\pm)} \left[|i_1\rangle \cdots |i_{\alpha_\nu -1}\rangle \quad |j_\nu\rangle \quad |i_{\alpha_\nu+1}\rangle \cdots |i_N\rangle\right] \tag{11.22}$$

$$= \hat{b}^\dagger_{k_n} \cdots \hat{b}^\dagger_{k_1} \sum_{\substack{\alpha_1<\cdots<\alpha_n\\ i_{\alpha_\nu}=k_\nu}} \frac{(\pm 1)^{\sum_\nu \alpha_\nu}}{\sqrt{(N-n)!}} \det{}^{(\pm)} \left[|i_1\rangle \cdots |i_{\alpha_\nu -1}\rangle \quad |i_{\alpha_\nu+1}\rangle \cdots |i_N\rangle\right] \tag{11.23}$$

$$= \hat{b}^\dagger_{k_n} \cdots \hat{b}^\dagger_{k_1} \hat{b}_{k_1} \cdots \hat{b}_{k_n} \frac{1}{\sqrt{N!}} \det{}^{(\pm)} \left[|i_1\rangle \cdots |i_{\alpha_\nu -1}\rangle \quad |i_{\alpha_\nu}\rangle \quad |i_{\alpha_\nu+1}\rangle \cdots |i_N\rangle\right] \tag{11.24}$$

結局, 次のように変形できることがわかる.

$$\hat{f}^{\mathrm{tot}} \frac{1}{\sqrt{N!}} \det{}^{(\pm)} \left[|i_1\rangle \cdots |i_N\rangle\right] \tag{11.25}$$

$$= \sum_{\substack{j_1,\ldots,j_n\in I\\ k_1,\ldots,k_n\in I}} \langle j_1 \cdots j_n | f | k_1 \cdots k_n\rangle \hat{b}^\dagger_{j_1} \cdots \hat{b}^\dagger_{j_n} \hat{b}_{k_1} \cdots \hat{b}_{k_n} |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S \frac{1}{\sqrt{N!}} \det{}^{(\pm)} \left[|i_1\rangle \cdots |i_N\rangle\right] \tag{11.26}$$

さらに全粒子数 N の Hilbert 空間における n 粒子演算子を一般の Bose 粒子系に埋め込むことで $\mathcal{H}_{Bose}$ 上では次のように表現できる.

$$\hat{f}^{\mathrm{tot}} = \frac{1}{n!} \sum_{\substack{j_1,\ldots,j_n\in I\\ k_1,\ldots,k_n\in I}} \langle j_1 \cdots j_n | f | k_1 \cdots k_n\rangle \hat{b}^\dagger_{j_1} \cdots \hat{b}^\dagger_{j_n} \hat{b}_{k_n} \cdots \hat{b}_{k_1} \tag{11.27}$$

□

12 1 粒子状態の完全正規直交系の取り替え

定理 12.1 (Q21-79(i)(ii)(iii))**.**

2 つの完全正規直交系 $(|\phi_i\rangle)_{i\in I}, (|\phi'_i\rangle)_{i\in I}$ に対してそれぞれ消滅演算子 $\hat{b}_i, \hat{b}'_i$

$$\hat{b}'_i = \sum_{j\in I} \langle \phi'_i | \phi_j\rangle \hat{b}_j \tag{12.1}$$

◇

証明

$$\hat{b}'^\dagger_i \frac{1}{\sqrt{N!}} \det{}^{(\pm)} \left[|\phi'_{i_1}\rangle \cdots |\phi'_{i_N}\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{(N+1)!}} \det{}^{(\pm)} \left[|\phi'_i\rangle \quad |\phi'_{i_1}\rangle \cdots |\phi'_{i_N}\rangle\right] \tag{12.2}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{(N+1)!}} \det{}^{(\pm)} \left[\textstyle\sum_{j\in I} |\phi_j\rangle\langle\phi_j|\phi'_i\rangle \quad |\phi'_{i_1}\rangle \cdots |\phi'_{i_N}\rangle\right] \tag{12.3}$$

$$= \sum_{j\in I} \langle \phi_j | \phi'_i\rangle \frac{1}{\sqrt{(N+1)!}} \det{}^{(\pm)} \left[|\phi_j\rangle \quad |\phi'_{i_1}\rangle \cdots |\phi'_{i_N}\rangle\right] \tag{12.4}$$

$$= \sum_{j\in I} \langle \phi_j | \phi'_i\rangle \hat{b}^\dagger_j \frac{1}{\sqrt{N!}} \det{}^{(\pm)} \left[|\phi'_{i_1}\rangle \cdots |\phi'_{i_N}\rangle\right] \tag{12.5}$$

これを

$$\hat{b}'^\dagger_i = \sum_{j\in I} \langle \phi_j | \phi'_i\rangle \hat{b}^\dagger_j \tag{12.6}$$

Hermite 共役を取ると示される.

$$\hat{b}'_i = \sum_{j\in I}\langle\phi'_i|\phi_j\rangle\hat{b}_j \tag{12.7}$$

□

さらに完全正規直交系を入れ替えると次のような式が成り立つ. (Q21-79(iv))

$$\hat{b}_i = \sum_{j\in I}\left\langle\phi_i\middle|\phi'_j\right\rangle\hat{b}'_j \tag{12.8}$$

$$\hat{b}^\dagger_i = \sum_{j\in I}\left\langle\phi'_j\middle|\phi_i\right\rangle\hat{b}'^\dagger_j \tag{12.9}$$

命題 12.2 (Q21-80)**.**

ある完全正規直交系の生成消滅演算子について交換・反交換関係が成り立つことは他の完全正規直交系でも成り立つことと同値である. ◇

証明

$$[\hat{b}_i,\hat{b}^\dagger_j]_\mp = \delta_{ij},\quad [\hat{b}_i,\hat{b}_j]_\mp = [\hat{b}^\dagger_i,\hat{b}^\dagger_j]_\mp = 0 \tag{12.10}$$

$$[\hat{b}_i,\hat{b}^\dagger_j]_\mp = \left[\sum_{k\in I}\langle\phi_i|\phi'_k\rangle\hat{b}'_k, \sum_{l\in I}\langle\phi'_l|\phi_j\rangle\hat{b}'^\dagger_l\right]_\mp = \sum_{k\in I}\sum_{l\in I}\langle\phi_i|\phi'_k\rangle\langle\phi'_l|\phi_j\rangle\left[\hat{b}'_k,\hat{b}'^\dagger_l\right]_\mp \tag{12.11}$$

$$= \sum_{k\in I}\sum_{l\in I}\langle\phi_i|\phi'_k\rangle\langle\phi'_l|\phi_j\rangle\delta_{kl} = \sum_{k\in I}\langle\phi_i|\phi'_k\rangle\langle\phi'_k|\phi_j\rangle = \langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij} \tag{12.12}$$

$$[\hat{b}_i,\hat{b}_j]_\mp = \left[\sum_{k\in I}\langle\phi_i|\phi'_k\rangle\hat{b}'_k, \sum_{l\in I}\langle\phi_j|\phi'_l\rangle\hat{b}'_l\right]_\mp = \sum_{k\in I}\sum_{l\in I}\langle\phi_i|\phi'_k\rangle\langle\phi_j|\phi'_l\rangle\left[\hat{b}'_k,\hat{b}'_l\right]_\mp = 0 \tag{12.13}$$

$$[\hat{b}^\dagger_i,\hat{b}^\dagger_j]_\mp = \left[\sum_{k\in I}\langle\phi'_k|\phi_i\rangle\hat{b}'^\dagger_k, \sum_{l\in I}\langle\phi'_l|\phi_j\rangle\hat{b}'^\dagger_l\right]_\mp = \sum_{k\in I}\sum_{l\in I}\langle\phi'_k|\phi_i\rangle\langle\phi_j|\phi'_l\rangle\left[\hat{b}'^\dagger_k,\hat{b}'^\dagger_l\right]_\mp = 0 \tag{12.14}$$

完全正規直交系を入れ替えれば逆も示せることがわかる. □

13 場の演算子の導入

定義 13.1 (場の演算子)**.**

スピン s を持つ 1 粒子系について考える.

その Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{single}$ の完全正規直交系を $(|\phi_i\rangle)_{i\in I}$ とする代わりに粒子の位置座標 $\boldsymbol{r}\in\mathbb{R}^3$ とスピンの z 成分 $s_z\in\{-s,-s+1,\ldots,s-1,s\}$ の固有状態 $|\boldsymbol{r},s_z\rangle$ からなる完全正規直交系とする.
このときの消滅演算子 $\hat{b}'_{\boldsymbol{r},s_z}$ を場の演算子 $\hat{\phi}(\boldsymbol{r},s_z)$ と定義する. また粒子数密度演算子 $\hat{\rho}(\boldsymbol{r},s_z)$ を次のように定義する.

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r},s_z) := \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r},s_z)\hat{\phi}(\boldsymbol{r},s_z) \tag{13.1}$$

今までの消滅, 生成演算子 $\hat{b}_i,\hat{b}^\dagger_i$ から場の演算子へ書き換える. (Q21-81(i)(ii), Q21-82, Q21-83, Q21-84, Q21-85(i)(ii))

定理 13.2.

ある固有状態 $|\phi_i\rangle$ に関して位置座標・スピンの z 成分により表示を固定した波動関数を $\phi_i(\boldsymbol{r}, s_z)$ とする.

$$\phi_i(\boldsymbol{r}, s_z) := \langle \boldsymbol{r}, s_z|\phi_i\rangle \tag{13.2}$$

場の演算子とその Hermite 共役 $\hat{\phi}, \hat{\phi}^\dagger$ と消滅, 生成演算子 $\hat{b}_i, \hat{b}_i^\dagger$ は互いに表現できる.

$$\hat{\phi}(\boldsymbol{r}, s_z) = \sum_{i\in I} \phi_i(\boldsymbol{r}, s_z)\hat{b}_i \tag{13.3}$$

$$\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}, s_z) = \sum_{i\in I} \phi_i^*(\boldsymbol{r}, s_z)\hat{b}_i^\dagger \tag{13.4}$$

◇

証明

$$\hat{\phi}(\boldsymbol{r}, s_z) = \hat{b}'_{\boldsymbol{r},s_z} = \sum_{i\in I}\langle \boldsymbol{r}, s_z|\phi_i\rangle\hat{b}_i = \sum_{i\in I} \phi_i(\boldsymbol{r}, s_z)\hat{b}_i \tag{13.5}$$

$$\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}, s_z) = \hat{b}'^\dagger_{\boldsymbol{r},s_z} = \sum_{i\in I}\langle \phi_i|\boldsymbol{r}, s_z\rangle\hat{b}_i^\dagger = \sum_{i\in I} \phi_i^*(\boldsymbol{r}, s_z)\hat{b}_i^\dagger \tag{13.6}$$

$$\hat{b}_i = \sum_{s_z=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\langle \phi_i|\boldsymbol{r}, s_z\rangle\hat{b}'_{\boldsymbol{r},s_z} = \sum_{s_z=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\phi_i^*(\boldsymbol{r}, s_z)\hat{\phi}(\boldsymbol{r}, s_z) \tag{13.7}$$

$$\hat{b}_i^\dagger = \sum_{s_z=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\langle \boldsymbol{r}, s_z|\phi_i\rangle\hat{b}'^\dagger_{\boldsymbol{r},s_z} = \sum_{s_z=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\phi_i(\boldsymbol{r}, s_z)\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}, s_z) \tag{13.8}$$

□

定理 13.3.

場の演算子とその Hermite 共役の交換・反交換関係

$$[\hat{\phi}(\boldsymbol{r}, s_z), \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}', s_z')]_\mp = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\delta_{s_z s_z'} \tag{13.9}$$

$$[\hat{\phi}(\boldsymbol{r}, s_z), \hat{\phi}(\boldsymbol{r}', s_z')]_\mp = [\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}, s_z), \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}', s_z')]_\mp = 0 \tag{13.10}$$

◇

定理 13.4.

粒子数密度演算子

$$\hat{N} = \sum_{i\in I}\hat{b}_i^\dagger\hat{b}_i = \sum_{s_z=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\hat{\rho}(\boldsymbol{r}, s_z) \tag{13.11}$$

◇

証明

□

定義 13.5 (複数の同種粒子の場).
スピン s を持つ複数の同種粒子がある系を考える．まず真空状態 $|\mathrm{vac}\rangle$ を次のように定義する．

$$\begin{cases} \hat{\phi}(\boldsymbol{r}, s_z)|\mathrm{vac}\rangle = 0 \quad (\boldsymbol{r} \in \mathbb{R}^3, s_z = -s, \dots, s) \\ \langle \mathrm{vac}|\mathrm{vac}\rangle = 1 \end{cases} \tag{13.12}$$

このとき複数の粒子状態は真空状態に場の演算子の Hermite 共役を適用することで表現できる．

$$|(\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu\in\mathbb{Z}_N}) := \frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_1, s_{z,1})\cdots\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_N, s_{z,N})|\mathrm{vac}\rangle \tag{13.13}$$

定理 13.6 (Q21-86(i)).
置換すると次のようになる．

$$|(\boldsymbol{r}_{\sigma(\mu)}, s_{z\sigma(\mu)})_{\mu\in X}) = (\pm 1)^\sigma |(\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu\in\mathbb{Z}_N}) \tag{13.14}$$

◇

証明

$$|(\boldsymbol{r}_{\sigma(\mu)}, s_{z\sigma(\mu)})_{\mu\in X}) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_{\sigma(1)}, s_{z\sigma(1)})\cdots\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_{\sigma(N)}, s_{z\sigma(N)})|\mathrm{vac}\rangle \tag{13.15}$$

$$= (\pm 1)^\sigma \frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_1, s_{z1})\cdots\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_N, s_{zN})|\mathrm{vac}\rangle \tag{13.16}$$

$$= (\pm 1)^\sigma |(\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu\in X}) \tag{13.17}$$

□

$$|(\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu\in X}) = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}(\pm 1)^\sigma |(\boldsymbol{r}_{\sigma(\mu)}, s_{z\sigma(\mu)})_{\mu\in X}) \tag{13.18}$$

定理 13.7 (Q21-86(ii)).
正規直交関係については次のようになる．

$$((\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu\in X}|(\boldsymbol{r}'_\mu, s'_{z\mu})_{\mu\in X'}) = \delta_{NN'}\frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}(\pm 1)^\sigma \delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}'_{\sigma(1)})\delta_{s_{z1}s'_{z\sigma(1)}}\cdots\delta(\boldsymbol{r}_N - \boldsymbol{r}'_{\sigma(N)})\delta_{s_{zN}s'_{z\sigma(N)}} \tag{13.19}$$

◇

証明

まずは $N = N'$ の場合を考える．

$$((\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu\in X}|(\boldsymbol{r}'_\mu, s'_{z\mu})_{\mu\in X}) = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}(\pm 1)^\sigma ((\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu\in X}|(\boldsymbol{r}'_{\sigma(\mu)}, s'_{z\sigma(\mu)})_{\mu\in X}) \tag{13.20}$$

$$= \frac{1}{N!^2}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}(\pm 1)^\sigma \langle \mathrm{vac}|\hat{\phi}(\boldsymbol{r}_N, s_{zN})\cdots\hat{\phi}(\boldsymbol{r}_1, s_{z1})\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}'_{\sigma(1)}, s'_{z\sigma(1)})\cdots\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}'_{\sigma(N)}, s'_{z\sigma(N)})|\mathrm{vac}\rangle \tag{13.21}$$

TODO:

$$\hat{\phi}(\boldsymbol{r}_N, s_{zN}) \cdots \hat{\phi}(\boldsymbol{r}_1, s_{z1}) \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}'_{\sigma(1)}, s'_{z\sigma(1)}) \cdots \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}'_{\sigma(N)}, s'_{z\sigma(N)}) \tag{13.22}$$

$$= \hat{\phi}(\boldsymbol{r}_1, s_{z1}) \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}'_{\sigma(1)}, s'_{z\sigma(1)}) \cdots \hat{\phi}(\boldsymbol{r}_N, s_{zN}) \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}'_{\sigma(N)}, s'_{z\sigma(N)}) \tag{13.23}$$

真空状態について交換関係・反交換関係を用いて次のように計算できる.

$$\hat{\phi}(\boldsymbol{r}, s_z) \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}', s'_z) |\mathrm{vac}\rangle = \pm \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}', s'_z) \hat{\phi}(\boldsymbol{r}, s_z) |\mathrm{vac}\rangle + \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \delta_{s_z s'_z} |\mathrm{vac}\rangle = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \delta_{s_z s'_z} |\mathrm{vac}\rangle \tag{13.24}$$

これを帰納的に適用することで次のように計算できる.

$$\langle \mathrm{vac} | \hat{\phi}(\boldsymbol{r}_1, s_{z1}) \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}'_{\sigma(1)}, s'_{z\sigma(1)}) \cdots \hat{\phi}(\boldsymbol{r}_N, s_{zN}) \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}'_{\sigma(N)}, s'_{z\sigma(N)}) | \mathrm{vac} \rangle \tag{13.25}$$

$$= \delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}'_{\sigma(1)}) \delta_{s_{z1} s'_{z\sigma(1)}} \cdots \delta(\boldsymbol{r}_N - \boldsymbol{r}'_{\sigma(N)}) \delta_{s_{zN} s'_{z\sigma(N)}} \langle \mathrm{vac} | \mathrm{vac} \rangle \tag{13.26}$$

$$= \delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}'_{\sigma(1)}) \delta_{s_{z1} s'_{z\sigma(1)}} \cdots \delta(\boldsymbol{r}_N - \boldsymbol{r}'_{\sigma(N)}) \delta_{s_{zN} s'_{z\sigma(N)}} \tag{13.27}$$

よって

$$((\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu \in X} | (\boldsymbol{r}'_\mu, s'_{z\mu})_{\mu \in X}) = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} (\pm 1)^\sigma \delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}'_{\sigma(1)}) \delta_{s_{z1} s'_{z\sigma(1)}} \cdots \delta(\boldsymbol{r}_N - \boldsymbol{r}'_{\sigma(N)}) \delta_{s_{zN} s'_{z\sigma(N)}} \tag{13.28}$$

となる. $N \neq N'$ の場合, Bose, Fermi 粒子系どちらも粒子数が異なる状態の内積は 0 より固有状態の内積も 0 となる. □

定理 13.8 (Q21-86(iii))**.**

単位演算子の分解は次のようになる.

$$\hat{1} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{s_{z1}=-s}^{s} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \cdots \sum_{s_{zN}=-s}^{s} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_N | (\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu \in X}) ((\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu \in X} | \tag{13.29}$$

◇

証明

$$\sum_{N=0}^{\infty} \sum_{s_{z1}=-s}^{s} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \cdots \sum_{s_{zN}=-s}^{s} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_N | (\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu \in X}) ((\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu \in X} | (\boldsymbol{r}'_\mu, s'_{z\mu})_{\mu \in X'}) \tag{13.30}$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{s_{z1}=-s}^{s} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \cdots \sum_{s_{zN}=-s}^{s} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_N | (\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu \in X}) \tag{13.31}$$

$$\delta_{NN'} \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} (\pm 1)^\sigma \delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}'_{\sigma(1)}) \delta_{s_{z1} s'_{z\sigma(1)}} \cdots \delta(\boldsymbol{r}_N - \boldsymbol{r}'_{\sigma(N)}) \delta_{s_{zN} s'_{z\sigma(N)}} \tag{13.32}$$

$$= \frac{1}{N'!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_{N'}} (\pm 1)^\sigma | (\boldsymbol{r}'_{\sigma(\mu)}, s'_{z\sigma(\mu)})_{\mu \in X'}) \tag{13.33}$$

$$= | (\boldsymbol{r}'_\mu, s'_{z\mu})_{\mu \in X'}) \tag{13.34}$$

□

定理 13.9 (Q21-86(iv)(v)(vi)).

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}, s_z)|(\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu\in\mathbb{Z}_N}) = \left(\sum_{\mu\in\mathbb{Z}_N} \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_\mu)\delta_{s_z s_{z\mu}}\right)|(\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu\in\mathbb{Z}_N}) \tag{13.35}$$

$$\hat{N}|(\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu\in\mathbb{Z}_N}) = N|(\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu\in\mathbb{Z}_N}) \tag{13.36}$$

◇

証明

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}, s_z)\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}', s_z') = \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}, s_z)\hat{\phi}(\boldsymbol{r}, s_z)\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}', s_z') \tag{13.37}$$

$$= \pm\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}, s_z)\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}', s_z')\hat{\phi}(\boldsymbol{r}, s_z) + \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta_{s_z s_{z'}}\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}, s_z) \tag{13.38}$$

$$= \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}', s_z')\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}, s_z)\hat{\phi}(\boldsymbol{r}, s_z) + \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta_{s_z s_{z'}}\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}', s_z') \tag{13.39}$$

$$= \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}', s_z')\hat{\rho}(\boldsymbol{r}, s_z) + \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta_{s_z s_{z'}}\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}', s_z') \tag{13.40}$$

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}, s_z)|(\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu\in\mathbb{Z}_N}) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\rho}(\boldsymbol{r}, s_z)\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_1, s_{z,1})\cdots\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_N, s_{z,N})|\mathrm{vac}\rangle \tag{13.41}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_1, s_{z,1})\cdots\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_N, s_{z,N})\hat{\rho}(\boldsymbol{r}, s_z)|\mathrm{vac}\rangle \tag{13.42}$$

$$+ \left(\sum_{\mu\in\mathbb{Z}_N} \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_\mu)\delta_{s_z s_{z\mu}}\right)\frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_1, s_{z,1})\cdots\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_N, s_{z,N})|\mathrm{vac}\rangle \tag{13.43}$$

$$= \left(\sum_{\mu\in\mathbb{Z}_N} \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_\mu)\delta_{s_z s_{z\mu}}\right)|(\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu\in\mathbb{Z}_N}) \tag{13.44}$$

$$\hat{N}|(\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu\in\mathbb{Z}_N}) = \sum_{s_z=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\hat{\rho}(\boldsymbol{r}, s_z)|(\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu\in\mathbb{Z}_N}) \tag{13.45}$$

$$= \sum_{s_z=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\left(\sum_{\mu\in\mathbb{Z}_N} \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_\mu)\delta_{s_z s_{z\mu}}\right)|(\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu\in\mathbb{Z}_N}) \tag{13.46}$$

$$= N|(\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})_{\mu\in\mathbb{Z}_N}) \tag{13.47}$$

□

定理 13.10.

$$\hat{f}^{\mathrm{tot}} = \frac{1}{n!}\sum_{s_{z1}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\cdots\sum_{s_{zn}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_n\sum_{s_{z1}'=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1'\cdots\sum_{s_{zn}'=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_n' \tag{13.48}$$

$$\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_1, s_{z1})\cdots\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_n, s_{zn})\langle\boldsymbol{r}_1, s_{z1}, \ldots, \boldsymbol{r}_n, s_{zn}|f|\boldsymbol{r}_1', s_{z1}', \ldots, \boldsymbol{r}_n', s_{zn}'\rangle\hat{\phi}(\boldsymbol{r}_n', s_{zn}')\cdots\hat{\phi}(\boldsymbol{r}_1', s_{z1}') \tag{13.49}$$

◇

証明

$$\hat{f}^{\mathrm{tot}} = \frac{1}{n!}\sum_{\substack{i_1,\ldots,i_n\in I\\ j_1,\ldots,j_n\in I}} \langle \phi_{i_1}\cdots\phi_{i_n}|f|\phi_{j_1}\cdots\phi_{j_n}\rangle \hat{b}^\dagger_{i_1}\cdots\hat{b}^\dagger_{i_n}\hat{b}_{j_n}\cdots\hat{b}_{j_1} \tag{13.50}$$

$$= \frac{1}{n!}\sum_{s_{z1}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\cdots\sum_{s_{zn}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_n \sum_{s'_{z1}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'_1\cdots\sum_{s'_{zn}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'_n \tag{13.51}$$

$$\sum_{\substack{i_1,\ldots,i_n\in I\\ j_1,\ldots,j_n\in I}} \phi^*_{i_1}(\boldsymbol{r}_1,s_{z1})\cdots\phi^*_{i_n}(\boldsymbol{r}_n,s_{zn})\phi_{j_1}(\boldsymbol{r}'_1,s'_{z1})\cdots\phi_{j_n}(\boldsymbol{r}'_n,s'_{zn})\langle \boldsymbol{r}_1,s_{z1},\ldots,\boldsymbol{r}_n,s_{zn}|f|\boldsymbol{r}'_1,s'_{z1},\ldots,\boldsymbol{r}'_n,s'_{zn}\rangle \tag{13.52}$$

$$\phi_{i_1}(\boldsymbol{r}_1,s_{z1})\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_1,s_{z1})\cdots\phi_{i_n}(\boldsymbol{r}_n,s_{zn})\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_n,s_{zn})\phi^*_{j_n}(\boldsymbol{r}'_n,s'_{zn})\hat{\phi}(\boldsymbol{r}'_n,s'_{zn})\cdots\phi^*_{j_1}(\boldsymbol{r}'_1,s'_{z1})\hat{\phi}(\boldsymbol{r}'_1,s'_{z1}) \tag{13.53}$$

$$= \frac{1}{n!}\sum_{s_{z1}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\cdots\sum_{s_{zn}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_n \sum_{s'_{z1}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'_1\cdots\sum_{s'_{zn}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'_n \tag{13.54}$$

$$\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_1,s_{z1})\cdots\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_n,s_{zn})\langle \boldsymbol{r}_1,s_{z1},\ldots,\boldsymbol{r}_n,s_{zn}|f|\boldsymbol{r}'_1,s'_{z1},\ldots,\boldsymbol{r}'_n,s'_{zn}\rangle\hat{\phi}(\boldsymbol{r}'_n,s'_{zn})\cdots\hat{\phi}(\boldsymbol{r}'_1,s'_{z1}) \tag{13.55}$$

□

例 13.11 (Q21-87, Q21-88, Q21-89(i)(ii), Q21-90, Q21-91(i)(ii)(iii)(iv), Q21-92)**.**
1 粒子演算子, 2 粒子演算子の和も同様に成り立ち, よくある物理系では次の関数を選ぶ.

$$\hat{h} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{\boldsymbol{r}} + V(\boldsymbol{r},\hat{\boldsymbol{s}}) \tag{13.56}$$

$$\hat{v} = V(\boldsymbol{r}_1,\hat{\boldsymbol{s}}_1,\boldsymbol{r}_2,\hat{\boldsymbol{s}}_2) \tag{13.57}$$

$$\hat{h}^{\mathrm{tot}} = \sum_{s_{z1}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \sum_{s_{z2}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_1,s_{z1})\langle \boldsymbol{r}_1,s_{z1}|h|\boldsymbol{r}_2,s_{z2}\rangle\hat{\phi}(\boldsymbol{r}_2,s_{z2}) \tag{13.58}$$

$$= \sum_{s_z=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \sum_{s'_z=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r},s_z)\langle \boldsymbol{r},s_z|\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{\boldsymbol{r}} + V(\boldsymbol{r},\hat{\boldsymbol{s}})\right]|\boldsymbol{r}',s'_z\rangle\hat{\phi}(\boldsymbol{r}',s'_z) \tag{13.59}$$

$$= \sum_{s_z=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \sum_{s'_z=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r},s_z)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\langle \boldsymbol{r},s_z|\boldsymbol{r}',s'_z\rangle\nabla^2_{\boldsymbol{r}} + \langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}'\rangle\langle s_z|V(\boldsymbol{r},\hat{\boldsymbol{s}})|s'_z\rangle\right]\hat{\phi}(\boldsymbol{r}',s'_z) \tag{13.60}$$

$$= \sum_{s_z=-s}^{s}\sum_{s'_z=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r},s_z)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\delta_{s_z s'_z}\Delta_{\boldsymbol{r}} + V_{s_z s'_z}(\boldsymbol{r})\right]\hat{\phi}(\boldsymbol{r},s'_z) \tag{13.61}$$

$$\hat{v}^{\mathrm{tot}} = \frac{1}{2}\sum_{s_{z1}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\sum_{s_{z2}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\sum_{s_{z3}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_3\sum_{s_{z4}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_4 \tag{13.62}$$

$$\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_1,s_{z1})\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_2,s_{z2})\langle \boldsymbol{r}_1,s_{z1},\boldsymbol{r}_2,s_{z2}|v|\boldsymbol{r}_3,s_{z3},\boldsymbol{r}_4,s_{z4}\rangle\hat{\phi}(\boldsymbol{r}_4,s_{z4})\hat{\phi}(\boldsymbol{r}_3,s_{z3}) \tag{13.63}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{s_{z1}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\sum_{s_{z2}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\sum_{s'_{z1}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'_1\sum_{s'_{z2}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'_2 \tag{13.64}$$

$$\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_1,s_{z1})\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_2,s_{z2})\langle \boldsymbol{r}_1,s_{z1},\boldsymbol{r}_2,s_{z2}|V(\boldsymbol{r}_1,\hat{\boldsymbol{s}}_1,\boldsymbol{r}_2,\hat{\boldsymbol{s}}_2)|\boldsymbol{r}'_1,s'_{z1},\boldsymbol{r}'_2,s'_{z2}\rangle\hat{\phi}(\boldsymbol{r}'_2,s'_{z2})\hat{\phi}(\boldsymbol{r}'_1,s'_{z1}) \tag{13.65}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{s_{z1}=-s}^{s}\sum_{s'_{z1}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\sum_{s_{z2}=-s}^{s}\sum_{s'_{z2}=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_1,s_{z1})\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}_2,s_{z2})V_{s_{z1},s_{z2},s'_{z1},s'_{z2}}\hat{\phi}(\boldsymbol{r}_2,s'_{z2})\hat{\phi}(\boldsymbol{r}_1,s'_{z1}) \tag{13.66}$$

$$V_{s_z s'_z}(\boldsymbol{r}) = \langle s_z|V(\boldsymbol{r},\hat{\boldsymbol{s}})|s'_z\rangle = \langle s'_z|V(\boldsymbol{r},\hat{\boldsymbol{s}})|s_z\rangle^* = V_{s'_z s_z}(\boldsymbol{r})^* \tag{13.67}$$

$$V_{s_{z1}s_{z2}s'_{z1}s'_{z2}}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = \langle s_{z1}s_{z2}|V(\boldsymbol{r}_1,\hat{\boldsymbol{s}}_1,\boldsymbol{r}_2,\hat{\boldsymbol{s}}_2)|s'_{z1}s'_{z2}\rangle \tag{13.68}$$

$$= \langle s'_{z1}s'_{z2}|V(\boldsymbol{r}_1,\hat{\boldsymbol{s}}_1,\boldsymbol{r}_2,\hat{\boldsymbol{s}}_2)|s_{z1}s_{z2}\rangle^* \tag{13.69}$$

$$= V_{s'_{z1}s'_{z2}s_{z1}s_{z2}}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)^* \tag{13.70}$$

◇

定義 13.12 (省略記法)**.**

ある粒子 μ の位置座標 $\boldsymbol{r}_\mu \in \mathbb{R}^3$ とスピンの z 成分 $s_{z\mu} = -s, -s+1, \ldots, s-1, s$ の組 $(\boldsymbol{r}_\mu, s_{z\mu})$ を μ とラベル付けする. ラベル μ と $\mathbb{Z}$ への随伴関手は省略する. つまり次のように

$$\sum_\mu f(\mu) = \sum_{s_z=-s}^{s}\sum_{s'_z=-s}^{s}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r} f(s_{z\mu}, s_{z'\mu}, \boldsymbol{r}_\mu) \tag{13.71}$$

$$(1,\ldots,N|1',\ldots,N') = \delta_{NN'}\delta(1,1')\cdots\delta(N,N') \tag{13.72}$$

$$\hat{1} = \sum_{N=0}^{\infty}\sum_{1,\ldots,N}|1,\ldots,N)(1,\ldots,N| \tag{13.73}$$

$$\hat{f}^{\mathrm{tot}} = \frac{1}{n!}\sum_{1,\ldots,2n}\hat{\phi}^\dagger(1)\cdots\hat{\phi}^\dagger(n)\langle 1\cdots n|f|n+1\cdots 2n\rangle\hat{\phi}(2n)\cdots\hat{\phi}(n+1) \tag{13.74}$$

$$\hat{h}^{\mathrm{tot}} = \sum_{1,2}\hat{\phi}^\dagger(1)\langle 1|h|2\rangle\hat{\phi}(2) \tag{13.75}$$

$$= \sum_{1}\hat{\phi}^\dagger(1)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 + V(1)\right]\hat{\phi}(1) \tag{13.76}$$

$$\hat{v}^{\mathrm{tot}} = \frac{1}{2}\sum_{1,2,3,4}\hat{\phi}^\dagger(1)\hat{\phi}^\dagger(2)\langle 12|v|34\rangle\hat{\phi}(4)\hat{\phi}(3) \tag{13.77}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{1,2}\hat{\phi}^\dagger(1)\hat{\phi}^\dagger(2)V(1,2)\hat{\phi}(2)\hat{\phi}(1) \tag{13.78}$$

$$\begin{cases}[\hat{\phi}(\mu),\hat{\phi}^\dagger(\nu)]_\mp = \delta(\mu,\nu) \\ [\hat{\phi}(\mu),\hat{\phi}(\nu)]_\mp = [\hat{\phi}^\dagger(\mu),\hat{\phi}^\dagger(\nu)]_\mp = 0\end{cases} \tag{13.79}$$

14 量子化された場の理論は粒子数を固定しない多体系の量子力学に等しい。

定義 14.1 (場の理論)**.**
このとき Schrödinger 方程式は次のように書ける.

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle \tag{14.1}$$

ただし場の理論の状態 $|\Psi(t)\rangle$ と Hamiltonian $\hat{H}$ は次のように展開できる.

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{N=0}^{\infty}\sum_{1,\dots,N}\Psi(1,\dots,N;t)|1,\dots,N) \tag{14.2}$$

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{one}} + \hat{H}_{\text{two}} = \sum_{1}\hat{\phi}^{\dagger}(1)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 + V(1)\right]\hat{\phi}(1) + \frac{1}{2}\sum_{1,2}\hat{\phi}^{\dagger}(1)\hat{\phi}^{\dagger}(2)V(1,2)\hat{\phi}(2)\hat{\phi}(1) \tag{14.3}$$

N 粒子の多体系の波動関数

定理 14.2 (Q21-93)**.**
展開係数の粒子の置換に関する対称性

$$\Psi(\sigma(1),\dots,\sigma(N);t) = (\pm 1)^{\sigma}\Psi(1,\dots,N;t) \tag{14.4}$$

◇

証明

$$\begin{aligned}|\Psi(t)\rangle &= \sum_{N=0}^{\infty}\sum_{1,\dots,N}\Psi(1,\dots,N;t)|1,\dots,N) &(14.5)\\ &= \sum_{N=0}^{\infty}\sum_{1,\dots,N}\Psi(\sigma(1),\dots,\sigma(N);t)|\sigma(1),\dots,\sigma(N)) &(14.6)\\ &= \sum_{N=0}^{\infty}\sum_{1,\dots,N}(\pm 1)^{\sigma}\Psi(\sigma(1),\dots,\sigma(N);t)|1,\dots,N) &(14.7)\end{aligned}$$

□

定理 14.3 (Q21-94(i)(ii)(iii)(iv)(v))**.**

$$[\hat{H},\hat{N}] = 0 \tag{14.8}$$

◇

証明

$$
\begin{aligned}
(1,\ldots,N|\Psi(t)\rangle &= \sum_{N'=0}^{\infty}\sum_{1',\ldots,N''}\Psi(1',\ldots,N'';t)(1,\ldots,N|1',\ldots,N'') && (14.9)\\
&= \sum_{N'=0}^{\infty}\sum_{1',\ldots,N''}\Psi(1',\ldots,N'';t)\delta_{NN'}\delta(1,1')\cdots\delta(N,N'') && (14.10)\\
&= \sum_{1',\ldots,N'}\Psi(1',\ldots,N';t)\delta(1,1')\cdots\delta(N,N') && (14.11)\\
&= \Psi(1,\ldots,N;t) && (14.12)
\end{aligned}
$$

$$
[\hat{H},\hat{N}] = \hat{H}_{\text{one}} + \hat{H}_{\text{two}} = \sum_{1}\hat{\phi}^{\dagger}(1)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 + V(1)\right]\hat{\phi}(1) + \frac{1}{2}\sum_{1,2}\hat{\phi}^{\dagger}(1)\hat{\phi}^{\dagger}(2)V(1,2)\hat{\phi}(2)\hat{\phi}(1) \qquad (14.13)
$$

$N \neq N'$ のとき

$$
(1,\ldots,N|\hat{H}|1',\ldots,N'') \qquad (14.14)
$$

□

定理 14.4 (Q21-94(v)(vi)(vii)(viii)(ix)(x)(xi)(xii)(xiii)(xiv)(xv)(xvi)(xvii)(xviii)(xix)(xx)(xxi)(xxii)(xxiii)(xxiv)(xxv)(xxvi)(xxvii)(xxviii))**.**

$$
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(1,\ldots,N;t) = \left(\sum_{I=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_I + V(I)\right] + \frac{1}{2}\sum_{\substack{1\leq I\leq N\\ 1\leq J\leq N\\ I\neq J}} V(I,J)\right)\Psi(1,\ldots,N;t) \qquad (14.15)
$$

◇

証明

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(1,\ldots,N;t) &= \sum_{N'=0}^{\infty}\sum_{1',\ldots,N''}(1,\ldots,N|\hat{H}|1',\ldots,N'')\Psi(1',\ldots,N'';t) && (14.16)\\
&= \sum_{1',\ldots,N'}(1,\ldots,N|\hat{H}|1',\ldots,N')\Psi(1',\ldots,N';t) && (14.17)
\end{aligned}
$$

$$\hat{H}_{\mathrm{one}}|1',\ldots,N') \tag{14.18}$$

$$= \sum_I \hat{\phi}^\dagger(I)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_I + V(I)\right]\hat{\phi}(I)\frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\phi}^\dagger(1')\cdots\hat{\phi}^\dagger(N')|\mathrm{vac}\rangle \tag{14.19}$$

$$= \sum_I \hat{\phi}^\dagger(I)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_I + V(I)\right]\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{J'=1'}^{N'}(\pm 1)^{J'}\delta(I,J')\hat{\phi}^\dagger(1')\cdots\hat{\phi}^\dagger(J'-1)\hat{\phi}^\dagger(J'+1)\cdots\hat{\phi}^\dagger(N')|\mathrm{vac}\rangle \tag{14.20}$$

$$= \sum_{J'=1'}^{N'}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_I \hat{\phi}^\dagger(I)\Delta_I\delta(I,J') + \sum_I \hat{\phi}^\dagger(I)V(I)\delta(I,J')\right](\pm 1)^{J'}\frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\phi}^\dagger(1')\cdots\hat{\phi}^\dagger(J'-1)\hat{\phi}^\dagger(J'+1)\cdots\hat{\phi}^\dagger(N')|\mathrm{vac}\rangle \tag{14.21}$$

$$= \sum_{J'=1'}^{N'}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{J'}\hat{\phi}^\dagger(J') + V(J')\hat{\phi}^\dagger(J')\right](\pm 1)^{J'}\frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\phi}^\dagger(1')\cdots\hat{\phi}^\dagger(J'-1)\hat{\phi}^\dagger(J'+1)\cdots\hat{\phi}^\dagger(N')|\mathrm{vac}\rangle \tag{14.22}$$

$$= \sum_{J'=1'}^{N'}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{J'} + V(J')\right]\frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\phi}^\dagger(1')\cdots\hat{\phi}^\dagger(N')|\mathrm{vac}\rangle \tag{14.23}$$

$$= \sum_{J'=1'}^{N'}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{J'} + V(J')\right]|1',\ldots,N') \tag{14.24}$$

$$\hat{H}_{\mathrm{two}}|1',\ldots,N') \tag{14.25}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{I,J}\hat{\phi}^\dagger(I)\hat{\phi}^\dagger(J)V(I,J)\hat{\phi}(J)\hat{\phi}(I)\frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\phi}^\dagger(1')\cdots\hat{\phi}^\dagger(N')|\mathrm{vac}\rangle \tag{14.26}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{I,J}V(I,J)\frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\phi}^\dagger(I)\hat{\phi}^\dagger(J)\hat{\phi}(J)\hat{\phi}(I)\hat{\phi}^\dagger(1')\cdots\hat{\phi}^\dagger(N')|\mathrm{vac}\rangle \tag{14.27}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{I,J}V(I,J)\frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\phi}^\dagger(I)\hat{\phi}^\dagger(J)\hat{\phi}(J)\sum_{K'=1'}^{N'}(\pm 1)^{K'}\delta(I,K')\hat{\phi}^\dagger(1')\cdots\hat{\phi}^\dagger(K'-1)\hat{\phi}^\dagger(K'+1)\cdots\hat{\phi}^\dagger(N')|\mathrm{vac}\rangle \tag{14.28}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{I,J}V(I,J)\frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\phi}^\dagger(I)\sum_{K'=1'}^{N'}(\pm 1)^{K'}\delta(I,K')\sum_{\substack{L'=1' \\ K'\neq L'}}^{N'}\delta(J,L')\hat{\phi}^\dagger(1')\cdots\hat{\phi}^\dagger(K'-1)\hat{\phi}^\dagger(K'+1)\cdots\hat{\phi}^\dagger(N')|\mathrm{vac}\rangle \tag{14.29}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{I,J}V(I,J)\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\substack{1'\leq K'\leq N' \\ 1'\leq L'\leq N' \\ K'\neq L'}}(\pm 1)^{K'}\delta(I,K')\delta(J,L')\hat{\phi}^\dagger(K')\hat{\phi}^\dagger(1')\cdots\hat{\phi}^\dagger(K'-1)\hat{\phi}^\dagger(K'+1)\cdots\hat{\phi}^\dagger(N')|\mathrm{vac}\rangle \tag{14.30}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{I,J}V(I,J)\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\substack{1'\leq K'\leq N' \\ 1'\leq L'\leq N' \\ K'\neq L'}}\delta(I,K')\delta(J,L')\hat{\phi}^\dagger(1')\cdots\hat{\phi}^\dagger(N')|\mathrm{vac}\rangle \tag{14.31}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{I,J}V(I,J)\sum_{\substack{1'\leq K'\leq N' \\ 1'\leq L'\leq N' \\ K'\neq L'}}\delta(I,K')\delta(J,L')|1',\ldots,N') \tag{14.32}$$

$$(1,\dots,N|\hat{H}_{\mathrm{one}}|1',\dots,N') = \sum_{I'=1'}^{N'}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{I'} + V(I')\right](1,\dots,N|1',\dots,N') \tag{14.33}$$

$$= \sum_{I'=1'}^{N'}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{I'} + V(I')\right]\delta_{NN}\delta(1,1')\cdots\delta(N,N') \tag{14.34}$$

$$= \sum_{I=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{I} + V(I)\right]\delta(1,1')\cdots\delta(N,N') \tag{14.35}$$

$$(1,\dots,N|\hat{H}_{\mathrm{two}}|1',\dots,N') = \frac{1}{2}\sum_{I,J}V(I,J)\sum_{\substack{1'\leq K'\leq N' \\ 1'\leq L'\leq N' \\ K'\neq L'}}\delta(I,K')\delta(J,L')(1,\dots,N|1',\dots,N') \tag{14.36}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{I,J}V(I,J)\sum_{\substack{1'\leq K'\leq N' \\ 1'\leq L'\leq N' \\ K'\neq L'}}\delta(I,K')\delta(J,L')\delta_{NN'}\delta(1,1')\cdots\delta(N,N') \tag{14.37}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\substack{1\leq I\leq N \\ 1\leq J\leq N \\ I\neq J}}V(I,J)\delta(1,1')\cdots\delta(N,N') \tag{14.38}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(1,\dots,N;t) = \sum_{1',\dots,N'}(1,\dots,N|\hat{H}|1',\dots,N')\Psi(1',\dots,N';t) \tag{14.39}$$

$$= \sum_{1',\dots,N'}\left(\sum_{I=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{I} + V(I)\right] + \frac{1}{2}\sum_{\substack{1\leq I\leq N \\ 1\leq J\leq N \\ I\neq J}}V(I,J)\right)\delta(1,1')\cdots\delta(N,N')\Psi(1',\dots,N';t) \tag{14.40}$$

$$= \left(\sum_{I=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{I} + V(I)\right] + \frac{1}{2}\sum_{\substack{1\leq I\leq N \\ 1\leq J\leq N \\ I\neq J}}V(I,J)\right)\Psi(1,\dots,N;t) \tag{14.41}$$

□

15 Heisenberg 表示での場の演算子の運動方程式

定理 15.1.

$V_{s_{z0}s_{z1}s'_{z0}s'_{z1}}(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_1) = 0$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\phi}(\boldsymbol{r},s_z;t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\boldsymbol{r}}\hat{\phi}(\boldsymbol{r},s_z;t) + \sum_{s'_z=-s}^{s}V_{s_z s'_z}(\boldsymbol{r})\hat{\phi}(\boldsymbol{r},s'_z;t) \tag{15.1}$$

◇

16 第二量子化 - 場の正準量子化の手続き

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(\boldsymbol{r},s_z;t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\boldsymbol{r}}\phi(\boldsymbol{r},s_z;t)+\sum_{s'_z=-s}^{s}V_{s_zs'_z}(\boldsymbol{r})\phi(\boldsymbol{r},s'_z;t) \tag{16.1}$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi^*(\boldsymbol{r},s_z;t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\boldsymbol{r}}\phi^*(\boldsymbol{r},s_z;t)+\sum_{s'_z=-s}^{s}\phi^*(\boldsymbol{r},s'_z;t)V_{s'_zs_z}(\boldsymbol{r}) \tag{16.2}$$

17 第二量子化 - 波動描像から粒子描像へ