

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 16 日

目次

1	もし、量子状態の対称化の要請がなかったら？	3
2	n 次対称群 \mathfrak{S}_n	7
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	11
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	23
5	計算練習	24
6	Bose, Fermi 粒子系の量子状態の粒子数表示	25
7	Bose 粒子系の消滅演算子 \hat{a}_i と生成演算子 \hat{a}_i^\dagger	27
8	Fermi 粒子系の消滅演算子 \hat{c}_i と生成演算子 \hat{c}_i^\dagger	32
9	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	36
10	ここからジャンプした方が良いのでは。あるいは、ここで十分では。	38
11	Bose 粒子系における m 粒子演算子の和の粒子数表示	38
12	Bose 粒子系における 1 粒子演算子の和の粒子数表示	40
13	Fermi 粒子系における m 粒子演算子の和の粒子数表示	41

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 (
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？

まず複数の同一粒子系における Hilbert 空間を定義する。

定義 (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, $|\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle, |\psi'_1\rangle \cdots |\psi'_N\rangle$ の内積は次のように定義する.

$$(\langle\psi_1| \cdots \langle\psi_N|) \cdot (|\psi'_1\rangle \cdots |\psi'_N\rangle) = \langle\psi_1|\psi'_1\rangle \cdots \langle\psi_N|\psi'_N\rangle. \quad (1.1)$$

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.

1 つ目の条件についてはどうやって観測しても区別することが出来ないことをよく表している. 今後の為に粒子交換を表す演算子を定義しておく.

定義 (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.

$$\hat{E}|\psi\rangle|\psi'\rangle = |\psi'\rangle|\psi\rangle. \quad (1.2)$$

2 つ目の条件は規格化条件を適用することで具体的には次のように書ける.

$$|\Psi\rangle = c_1|\alpha\rangle|\beta\rangle + c_2|\beta\rangle|\alpha\rangle \quad (c_1, c_2 \in \mathbb{C}) \quad (1.3)$$

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1. \quad (1.4)$$

この章ではこれらの環境下で状態や演算子はどのような性質を持つのかを調べていく.

問題 1.1 (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.

$$|\Psi\rangle \sim \hat{E}|\Psi\rangle \iff c_1|\alpha\rangle|\beta\rangle + c_2|\beta\rangle|\alpha\rangle \sim c_1|\beta\rangle|\alpha\rangle + c_2|\alpha\rangle|\beta\rangle \iff c_1 = \pm c_2. \quad (1.5)$$

よって粒子状態は次のようになる.

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle \pm |\beta\rangle|\alpha\rangle). \quad (1.6)$$

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. \diamond

命題 1.2 (Q21-1(ii)).

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

$$\begin{cases} |\Psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle) \\ |\Psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle) \end{cases}. \quad (1.7)$$

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.

$$|\Psi\rangle = c_S|\Psi_S\rangle + c_A|\Psi_A\rangle. \quad (1.8)$$

\diamond

証明

まず十分性について D を満たす任意の粒子状態 $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^{(2)}$ は $|\alpha\rangle|\beta\rangle, |\beta\rangle|\alpha\rangle$ の重ね合わせにより表現できる. これより

$$|\Psi\rangle = c_1|\alpha\rangle|\beta\rangle + c_2|\beta\rangle|\alpha\rangle \quad (1.9)$$

$$= \frac{c_1 + c_2}{2}(|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle) + \frac{c_1 - c_2}{2}(|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle) \quad (1.10)$$

$$= \frac{c_1 + c_2}{\sqrt{2}}|\Psi_S\rangle + \frac{c_1 - c_2}{\sqrt{2}}|\Psi_A\rangle. \quad (1.11)$$

であり, 次のようにおくことで $|\Psi\rangle$ は $|\Psi_S\rangle, |\Psi_A\rangle$ の重ね合わせとして表現できる.

$$c_S = \frac{c_1 + c_2}{\sqrt{2}}, \quad c_A = \frac{c_1 - c_2}{\sqrt{2}}. \quad (1.12)$$

逆に必要性について任意の係数 c_S, c_A について $|\alpha\rangle|\beta\rangle, |\beta\rangle|\alpha\rangle$ の重ね合わせで表現できることは次のように分かる.

$$|\Psi\rangle = c_S|\Psi_S\rangle + c_A|\Psi_A\rangle \quad (1.13)$$

$$= \frac{c_S}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle) + \frac{c_A}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle) \quad (1.14)$$

$$= \frac{c_S + c_A}{\sqrt{2}}|\alpha\rangle|\beta\rangle + \frac{c_S - c_A}{\sqrt{2}}|\beta\rangle|\alpha\rangle. \quad (1.15)$$

よって同値な表現であることが示された. \square

命題 1.3 (Q21-1(iii)(iv)(v)).

交換演算子について次の性質が認められる.

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

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

\diamond

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.

$$\hat{E}^{-1}|\psi\rangle|\psi'\rangle = \hat{E}^{-1}\hat{E}|\psi'\rangle|\psi\rangle = |\psi'\rangle|\psi\rangle \quad (1.18)$$

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

これより次のことが分かる.

$$\hat{E} = \hat{E}^\dagger = \hat{E}^{-1}, \quad \hat{E}^2 = \hat{E}\hat{E}^{-1} = \hat{1}. \quad (1.20)$$

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

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

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

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.

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

\square

命題 1.4 (Q21-1(vi)(vii)(viii)).

次の 4 つはそれぞれ互いに同値である.

1. 2つの粒子は区別できない.
2. Hilbert 空間 $\mathcal{H}^{(2)}$ の任意の観測量 \hat{O} の期待値 $\langle \hat{O} \rangle$ は粒子交換に関して不変である.
3. Hilbert 空間 $\mathcal{H}^{(2)}$ の任意の観測量 \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.
4. Hilbert 空間 $\mathcal{H}^{(2)}$ の任意の観測量 \hat{O} と交換演算子 \hat{E} は可換である.

◇

証明

最初の 2 つは同値であることを既に認めている. 2 から 3 を示す. 期待値について $|\Psi\rangle \rightarrow \hat{E}|\Psi\rangle$ と状態を変更しても不変であるから次のようになる.

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

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. 3 から 2 についても同じ式を辿ればよい. 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 Hermite 演算子となり整合性は保っている. 次に 3 から 4 を示す.

$$\hat{E}\hat{O} = \hat{E}\hat{E}\hat{O}\hat{E} = \hat{O}\hat{E}. \quad (1.25)$$

つまり $[\hat{O}, \hat{E}] = 0$ であるから \hat{O}, \hat{E} は可換である. 逆に 4 から 3 は自明である. よって全て互いに同値であることは示された. □

命題 1.5 (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.

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

◇

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.

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle \quad (1.27)$$

$$= (c_S^* \langle \Psi_S | + c_A^* \langle \Psi_A |) \hat{O} (c_S | \Psi_S \rangle + c_A | \Psi_A \rangle) \quad (1.28)$$

$$= |c_S|^2 \langle \Psi_S | \hat{O} | \Psi_S \rangle + |c_A|^2 \langle \Psi_A | \hat{O} | \Psi_A \rangle + c_S^* c_A \langle \Psi_S | \hat{O} | \Psi_A \rangle + c_A^* c_S \langle \Psi_A | \hat{O} | \Psi_S \rangle \quad (1.29)$$

$$= |c_S|^2 \langle \Psi_S | \hat{O} | \Psi_S \rangle + |c_A|^2 \langle \Psi_A | \hat{O} | \Psi_A \rangle. \quad (1.30)$$

ただし式 (1.30) において次のような計算をした.

$$\langle \Psi_S | \hat{O} | \Psi_A \rangle = \langle \Psi_S | \hat{E} \hat{O} \hat{E} | \Psi_A \rangle = -\langle \Psi_S | \hat{O} | \Psi_A \rangle = 0 \quad (1.31)$$

$$\langle \Psi_A | \hat{O} | \Psi_S \rangle = \langle \Psi_A | \hat{E} \hat{O} \hat{E} | \Psi_S \rangle = -\langle \Psi_A | \hat{O} | \Psi_S \rangle = 0. \quad (1.32)$$

□

問題 1.6 (Q21-1(x)).

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

$$\langle \Psi_S | \hat{O} | \Psi_S \rangle = \frac{1}{2}(\langle\alpha|\langle\beta| + \langle\beta|\langle\alpha|)\hat{O}(|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle) = +1 \quad (1.33)$$

$$\langle \Psi_A | \hat{O} | \Psi_A \rangle = \frac{1}{2}(\langle\alpha|\langle\beta| - \langle\beta|\langle\alpha|)\hat{O}(|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle) = -1. \quad (1.34)$$

より c_S, c_A は互いに依存しない. ◇

問題 1.7 (Q21-1(xi)).

交換演算子は多分既約元であり, 区別できない情報が観測量の演算子に吸収されているので粒子が区別できないならば粒子状態の粒子を区別できないとは示せない. 問題 1.1 のように係数は決まらず, 理論の予言能力に問題はない. ◇

これでは不便なので同一の 2 粒子系について $|\Psi\rangle = \pm \hat{E}|\Psi\rangle$ を満たすという対称化の要請をする.

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 (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 $\sigma: X \rightarrow X$ 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. $X = \{1, 2, \dots, n\}$ のとき X 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 2.1 (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.

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

◇

証明

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

□

定理 2.2 (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.

$$\sigma\tau(a) = \sigma \circ \tau(a) = \sigma(\tau(a)) = c. \quad (2.3)$$

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.

$$\sigma\tau(a) = \sigma\tau(b) \implies \tau(a) = \tau(b) \implies a = b. \quad (2.4)$$

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 $\sigma\text{id}_X = \text{id}_X\sigma = \sigma$ 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 $\sigma\sigma^{-1} = \text{id}_X$ 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 2.3 (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.

□

命題 2.4 (Q21-5(i)(ii), Q21-6(i)(ii)).

$\sigma_0 \in \mathfrak{S}_n$ とすると $\sigma_0 \mathfrak{S}_n = \mathfrak{S}_n \sigma_0 = \mathfrak{S}_n^{-1} = \mathfrak{S}_n$ 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 $f: \mathfrak{S}_n \rightarrow R$ があるとき次のようになる.

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

□

定義 (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 2.5.

任意の置換は一意的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, \dots, 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.

次に σ' に対しては i_1, \dots, i_m ではない元を選び同様の操作を行う. これを帰納的に行うことで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 2.6 (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.

$$(i_1 i_2 \cdots i_m) = (i_1 i_3 \cdots i_m)(i_1 i_2) \quad (2.6)$$

$$= (i_1 i_4 \cdots i_m)(i_1 i_3)(i_1 i_2) \quad (2.7)$$

$$= (i_1 i_m)(i_1 i_{m-1}) \cdots (i_1 i_3)(i_1 i_2). \quad (2.8)$$

これは上のように変形することにより示される. \square

定義 (符号).

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

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

命題 2.7 (Q21-7(ii)).

置換の符号は well-defined である. \diamond

証明

次のように定義される差積 $\Delta(x_1, \dots, x_n)$ 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.

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

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

$$(x_j - x_i) \mapsto -(x_j - x_i) \quad (2.11)$$

$$(x_a - x_i)(x_a - x_j) \mapsto (x_a - x_i)(x_a - x_j) \quad (2.12)$$

$$(x_i - x_a)(x_a - x_j) \mapsto (x_i - x_a)(x_a - x_j) \quad (2.13)$$

$$(x_i - x_a)(x_j - x_a) \mapsto (x_i - x_a)(x_j - x_a). \quad (2.14)$$

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

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

となる為, 互換の積の個数の偶奇は一致する. \square

命題 2.8 (Q21-8(i)(ii)(iii)).

置換の符号 $\text{sgn} : \mathfrak{S}_n \rightarrow \mathbb{Z}^\times$ は準同型写像である. ◇

証明

差積を用いることで

$$\text{sgn}(\sigma\tau)\Delta(x_1, \dots, x_n) = \Delta(x_{\sigma\tau(1)}, \dots, x_{\sigma\tau(n)}) \quad (2.16)$$

$$= \text{sgn}(\sigma)\Delta(x_{\tau(1)}, \dots, x_{\tau(n)}) = \text{sgn}(\sigma)\text{sgn}(\tau)\Delta(x_1, \dots, x_n). \quad (2.17)$$

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

$$\text{sgn}(\text{id}_X) = \text{sgn}(\text{id}_X)\text{sgn}(\text{id}_X) = 1 \quad (2.18)$$

$$\text{sgn}(\sigma^{-1}) = \text{sgn}(\text{id}_X)\text{sgn}(\sigma)^{-1} = \text{sgn}(\sigma)^{-1} = \text{sgn}(\sigma) \quad (2.19)$$

□

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 (置換演算子).

N 個の同一の粒子 X_1, \dots, 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 3.1 (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.

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

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

◇

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.

$$\langle \xi_1 | \cdots \langle \xi_N | \hat{P}(\sigma) | \psi_1 \rangle \cdots | \psi_N \rangle = \langle \xi_1 | \cdots \langle \xi_N | \psi_{\sigma^{-1}(1)} \rangle \cdots | \psi_{\sigma^{-1}(N)} \rangle \quad (3.3)$$

$$= \langle \xi_{\sigma(1)} | \cdots \langle \xi_{\sigma(N)} | \psi_1 \rangle \cdots | \psi_N \rangle \quad (3.4)$$

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.

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

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

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.

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

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

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

□

定理 3.2 (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.

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

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

そして準同型であることは次のようにして成り立つ.

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

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

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

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

$$\hat{P}(\text{id}_X) = \hat{1} \quad (3.15)$$

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

となる.

□

定義 (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, $\hat{P}(\sigma)|\Psi\rangle = \text{sgn}(\sigma)|\Psi\rangle$ となるとき完全反対称であると定義する. として完全対称, 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 3.3 (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. \diamond

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 $\sigma_1, \dots, \sigma_m \in \mathfrak{S}_N$ を用いて $\sigma = \sigma_1 \cdots \sigma_m$ と書け, 次のようになる.

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

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

これより同値であることがわかる. \square

命題 3.4 (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.

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

\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.

$$\langle \Psi_S | \Psi_A \rangle = \langle \Psi_S | \hat{P}(\sigma)^\dagger \hat{P}(\sigma) | \Psi_A \rangle \quad (3.20)$$

$$= -\langle \Psi_S | \Psi_A \rangle = 0. \quad (3.21)$$

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.

$$\sum_i c^{(i)} \left(|\psi_1^{(i)}\rangle |\psi_2^{(i)}\rangle + |\psi_2^{(i)}\rangle |\psi_1^{(i)}\rangle \right) \in \mathcal{H}_S^{(2)} \quad (3.22)$$

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

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.

$$|\psi_1\rangle |\psi_2\rangle |\psi_3\rangle + |\psi_2\rangle |\psi_3\rangle |\psi_1\rangle + |\psi_3\rangle |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle + |\psi_1\rangle |\psi_3\rangle |\psi_2\rangle + |\psi_2\rangle |\psi_1\rangle |\psi_3\rangle + |\psi_3\rangle |\psi_2\rangle |\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_S^{(N)} \quad (3.24)$$

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

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 3.5 (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.

$$\hat{\mathcal{S}}^{(N)} = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \hat{P}(\sigma) \quad (3.26)$$

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

\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.

$$\hat{P}(\tau) \hat{\mathcal{S}}^{(N)} = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \hat{P}(\tau\sigma) = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma' \in \mathfrak{S}_N} \hat{P}(\sigma') = \hat{\mathcal{S}}^{(N)} \quad (3.28)$$

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

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

$$(\hat{\mathcal{S}}^{(N)})^2 = \frac{1}{N!^2} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \sum_{\tau \in \mathfrak{S}_N} \hat{P}(\sigma\tau) = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma' \in \mathfrak{S}_N} \hat{P}(\sigma') = \hat{\mathcal{S}}^{(N)} \quad (3.30)$$

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

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. \square

命題 3.6 (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.

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

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

◇

証明

次に置換演算子の unitary 性より Hermite 演算子となる.

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

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

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

$$\hat{\mathcal{S}}^{(N)} \hat{\mathcal{A}}^{(N)} = \hat{\mathcal{A}}^{(N)} \hat{\mathcal{S}}^{(N)} = \frac{1}{N!^2} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \sum_{\tau \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\tau) \hat{P}(\sigma\tau) \quad (3.36)$$

$$= \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma) \left(\frac{1}{N!} \sum_{\sigma' \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma') \hat{P}(\sigma') \right) \quad (3.37)$$

$$= 0. \quad (3.38)$$

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

$$\hat{\mathcal{S}}^{(2)} + \hat{\mathcal{A}}^{(2)} = \frac{1}{2!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_2} \left(\hat{P}(\sigma) + \text{sgn}(\sigma) \hat{P}(\sigma) \right) = 1_{\mathcal{H}^{(2)}} \quad (3.39)$$

$$\hat{\mathcal{S}}^{(N)} + \hat{\mathcal{A}}^{(N)} = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \left(\hat{P}(\sigma) + \text{sgn}(\sigma) \hat{P}(\sigma) \right) \neq \hat{1}_{\mathcal{H}^{(N)}} \quad (N \geq 3). \quad (3.40)$$

とわかる. □

定理 3.7 (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 $\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle = 0$ 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 $\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle = 0$ となる. □

補題 3.8.

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.

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

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

◇

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.

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

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

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. \square

命題 3.9 (Q21-16(i)(ii), Q21-17(i)(ii), Q21-18(i)(ii)).

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

$$\mathcal{H}_S^{(N)} = \text{span}\left\{\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \mid (i_1, \dots, i_N) \in I_S^{(N)}\right\} \quad (3.45)$$

$$\mathcal{H}_A^{(N)} = \text{span}\left\{\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \mid (i_1, \dots, i_N) \in I_A^{(N)}\right\} \quad (3.46)$$

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

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

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

◇

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。

$$\hat{\mathcal{S}}^{(N)}\mathcal{H}^{(N)} = \hat{\mathcal{S}}^{(N)} \text{span}\left\{|\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle \mid |\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle \in \mathcal{H}^{(N)}\right\} \quad (3.49)$$

$$= \text{span}\left\{\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle \mid |\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle \in \mathcal{H}^{(N)}\right\} \quad (3.50)$$

$$= \hat{\mathcal{S}}^{(N)} \text{span}\{|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \mid i_1, \dots, i_N \in I\} \quad (3.51)$$

$$= \text{span}\left\{\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \mid i_1, \dots, i_N \in I\right\} \quad (3.52)$$

$$= \text{span}\left\{\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \mid (i_1, \dots, i_N) \in I_S^{(N)}\right\} \quad (3.53)$$

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。

$$\hat{\mathcal{A}}^{(N)}\mathcal{H}^{(N)} = \hat{\mathcal{A}}^{(N)} \text{span}\left\{|\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle \mid |\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle \in \mathcal{H}^{(N)}\right\} \quad (3.54)$$

$$= \text{span}\left\{\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle \mid |\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle \in \mathcal{H}^{(N)}\right\} \quad (3.55)$$

$$= \hat{\mathcal{A}}^{(N)} \text{span}\{|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \mid i_1, \dots, i_N \in I\} \quad (3.56)$$

$$= \text{span}\left\{\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \mid i_1, \dots, i_N \in I\right\} \quad (3.57)$$

$$= \text{span}\left\{\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \mid (i_1, \dots, i_N) \in I_A^{(N)}\right\} \quad (3.58)$$

これらに対して補題 3.8 を適用して示される。 \square

定義 (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 $\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle$ ($i_1, \dots, i_N \in I_S^{(N)}$) 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 $\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle$ ($i_1, \dots, i_N \in I_A^{(N)}$) 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 3.10 (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。

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

\diamond

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.

$$\|\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\| = \sqrt{\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}|\hat{\mathcal{S}}^{(N)\dagger}\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle} \quad (3.60)$$

$$= \frac{1}{N!} \sqrt{\sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \sum_{\tau \in \mathfrak{S}_N} \langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}|\hat{P}(\tau)^\dagger \hat{P}(\sigma)|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle} \quad (3.61)$$

$$= \frac{1}{N!} \sqrt{\sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \sum_{\tau \in \mathfrak{S}_N} \langle\phi_{\tau^{-1}(i_1)}|\cdots\langle\phi_{\tau^{-1}(i_N)}|\phi_{\sigma^{-1}(i_1)}\rangle\cdots|\phi_{\sigma^{-1}(i_N)}\rangle} \quad (3.62)$$

$$= \sqrt{\frac{\prod_{i \in I} n_i!}{N!}} \quad (3.63)$$

これより基底状態は次のように書ける.

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

さらに変形を進めると次のようになる.

$$\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \hat{P}(\sigma)|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \quad (3.65)$$

$$= \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} |\phi_{\sigma^{-1}(i_1)}\rangle\cdots|\phi_{\sigma^{-1}(i_N)}\rangle \quad (3.66)$$

$$= \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} |\phi_{i_{\sigma(1)}}\rangle\cdots|\phi_{i_{\sigma(N)}}\rangle \quad (3.67)$$

$$= \frac{\prod_{i \in I} n_i!}{N!} \sum_{(i_1, \dots, i_N) \sim (i'_1, \dots, i'_N)} |\phi_{i'_1}\rangle\cdots|\phi_{i'_N}\rangle \quad (3.68)$$

$$= \frac{1}{N!} \text{per} \begin{bmatrix} |\phi_{i_1}\rangle^{(1)} & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle^{(1)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ |\phi_{i_1}\rangle^{(N)} & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle^{(N)} \end{bmatrix} \quad (3.69)$$

$$= \frac{1}{N!} \text{per} [|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] \quad (3.70)$$

よって次のようになる.

$$|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{i \in I} n_i!}} \text{per} [|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle]. \quad (3.71)$$

□

命題 3.11 (Q21-20(iv)(v)(vi)).

粒子状態 $|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S$ は $\mathcal{H}_S^{(N)}$ の正規直交基底となる.

◇

証明

粒子状態 $|\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S \in \mathcal{H}_S^{(N)}$ は次のように展開できる. これを用いて計算する.

$$|\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S = \sqrt{\frac{N!}{\prod_{i \in I} n_i!}} \hat{\mathcal{S}}^{(N)} |\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{i \in I} n_i!}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \hat{P}(\sigma) |\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \quad (3.72)$$

まず正規直交関係については次のように計算できる.

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

$$= \frac{1}{\sqrt{\prod_{i \in I} n_i! n'_i!}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \langle \phi_{i_1} | \cdots \langle \phi_{i_N} | \hat{P}(\sigma) | \phi_{i'_1} \rangle \cdots | \phi_{i'_N} \rangle \quad (3.74)$$

$$= \delta_{i_1 i'_1} \cdots \delta_{i_N i'_N} \quad (3.75)$$

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.

$$\mathcal{H}_S^{(N)} = \text{span} \left\{ \hat{\mathcal{S}}^{(N)} |\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \mid (i_1, \dots, i_N) \in I_S^{(N)} \right\} \quad (3.76)$$

$$= \text{span} \left\{ |\phi_{i'_1} \cdots \phi_{i'_N}\rangle_S \mid (i_1, \dots, i_N) \in I_S^{(N)} \right\} \quad (3.77)$$

そして完備性については次のように計算できる.

$$\sum_{(i_1, \dots, i_N) \in I_S^{(N)}} |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S \langle \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}|_S \quad (3.78)$$

$$= \sum_{(i_1, \dots, i_N) \in I_S^{(N)}} \frac{1}{N! \prod_{i \in I} n_i!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \sum_{\tau \in \mathfrak{S}_N} \hat{P}(\sigma) |\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \langle \phi_{i_1} | \cdots \langle \phi_{i_N} | \hat{P}^\dagger(\tau) \quad (3.79)$$

$$= \sum_{(i_1, \dots, i_N) \in I_S^{(N)}} \frac{1}{\prod_{i \in I} n_i!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \hat{P}(\sigma) |\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \langle \phi_{i_1} | \cdots \langle \phi_{i_N} | \quad (3.80)$$

$$= \sum_{(i_1, \dots, i_N) \in I_S^{(N)}} |\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \langle \phi_{i_1} | \cdots \langle \phi_{i_N} | \quad (3.81)$$

$$= \hat{1}_{\mathcal{H}_S^{(N)}}. \quad (3.82)$$

よって $|\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S$ は正規直交基底となる. □

定理 3.12 (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.

$$|\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_A = \sqrt{N!} \hat{\mathcal{A}}^{(N)} |\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \left[|\phi_{i_1}\rangle \quad \cdots \quad |\phi_{i_N}\rangle \right] \quad (3.83)$$

◇

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.

$$\|\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\| = \sqrt{\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}|\hat{\mathcal{A}}^{(N)\dagger}\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle} \quad (3.84)$$

$$= \frac{1}{N!} \sqrt{\sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \sum_{\tau \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\tau\sigma) \langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}|\hat{P}(\tau)^\dagger \hat{P}(\sigma)|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle} \quad (3.85)$$

$$= \frac{1}{N!} \sqrt{\sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma^2)} \quad (3.86)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \quad (3.87)$$

これより基底状態は次のように書ける.

$$|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A = \sqrt{N!}\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \quad (3.88)$$

さらに変形を進めると次のようになる.

$$\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma) \hat{P}(\sigma)|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \quad (3.89)$$

$$= \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma) |\phi_{\sigma^{-1}(i_1)}\rangle\cdots|\phi_{\sigma^{-1}(i_N)}\rangle \quad (3.90)$$

$$= \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma) |\phi_{i_{\sigma(1)}}\rangle\cdots|\phi_{i_{\sigma(N)}}\rangle \quad (3.91)$$

$$= \frac{1}{N!} \det \begin{bmatrix} |\phi_{i_1}\rangle^{(1)} & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle^{(1)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ |\phi_{i_1}\rangle^{(N)} & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle^{(N)} \end{bmatrix} \quad (3.92)$$

$$= \frac{1}{N!} \det \begin{bmatrix} |\phi_{i_1}\rangle & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle \end{bmatrix} \quad (3.93)$$

よって次のようになる.

$$|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{bmatrix} |\phi_{i_1}\rangle & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle \end{bmatrix} \quad (3.94)$$

□

命題 3.13 (Q21-21(iii)(iv)(v)).

粒子状態 $|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A$ は $\mathcal{H}_A^{(N)}$ の正規直交基底となる.

◇

証明

粒子状態 $|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A \in \mathcal{H}_A^{(N)}$ は次のように展開できる. これをそれぞれに適用することで示す.

$$|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A = \sqrt{N!}\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma) \hat{P}(\sigma)|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \quad (3.95)$$

まず正規直交関係については次のように計算できる.

$$\langle \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N} | \phi_{i'_1} \cdots \phi_{i'_N} \rangle_A = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \sum_{\tau \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma^{-1}\tau) \langle \phi_{i_1} | \cdots \langle \phi_{i_N} | \hat{P}(\sigma^{-1}\tau) | \phi_{i'_1} \rangle \cdots | \phi_{i'_N} \rangle \quad (3.96)$$

$$= \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma) \langle \phi_{i_1} | \cdots \langle \phi_{i_N} | \hat{P}(\sigma) | \phi_{i'_1} \rangle \cdots | \phi_{i'_N} \rangle \quad (3.97)$$

$$= \delta_{i_1 i'_1} \cdots \delta_{i_N i'_N}. \quad (3.98)$$

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.

$$\mathcal{H}_A^{(N)} = \text{span} \left\{ \hat{\mathcal{A}}^{(N)} | \phi_{i_1} \rangle \cdots | \phi_{i_N} \rangle \mid (i_1, \dots, i_N) \in I_A^{(N)} \right\} \quad (3.99)$$

$$= \text{span} \left\{ | \phi_{i'_1} \cdots \phi_{i'_N} \rangle_A \mid (i_1, \dots, i_N) \in I_A^{(N)} \right\}. \quad (3.100)$$

最後に完備性については次のように計算できる.

$$\sum_{(i_1, \dots, i_N) \in I_A^{(N)}} | \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N} \rangle_A \langle \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N} |_A \quad (3.101)$$

$$= \sum_{(i_1, \dots, i_N) \in I_A^{(N)}} \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \sum_{\tau \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma\tau) \hat{P}(\sigma) | \phi_{i_1} \rangle \cdots | \phi_{i_N} \rangle \langle \phi_{i_1} | \cdots \langle \phi_{i_N} | \hat{P}^\dagger(\tau) \quad (3.102)$$

$$= \sum_{(i_1, \dots, i_N) \in I_A^{(N)}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma) \hat{P}(\sigma) | \phi_{i_1} \rangle \cdots | \phi_{i_N} \rangle \langle \phi_{i_1} | \cdots \langle \phi_{i_N} | \quad (3.103)$$

$$= \sum_{(i_1, \dots, i_N) \in I_A^{(N)}} | \phi_{i_1} \rangle \cdots | \phi_{i_N} \rangle \langle \phi_{i_1} | \cdots \langle \phi_{i_N} | \quad (3.104)$$

$$= \hat{1}_{\mathcal{H}_A^{(N)}}. \quad (3.105)$$

よって $| \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N} \rangle_A$ は $\mathcal{H}_A^{(N)}$ の正規直交基底となる. \square

命題 3.14 (Q21-22(i)(ii)(iii)(iv), Q21-23(i)(ii)(iii)(iv)).

正規直交基底 $| \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N} \rangle_S, | \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N} \rangle_A$ について完全対称性, 完全反対称性, 線形性が成り立つ.

$$| \phi_{i_{\sigma(1)}} \cdots \phi_{i_{\sigma(N)}} \rangle_S = | \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N} \rangle_S \quad (3.106)$$

$$| \phi_{i_{\sigma(1)}} \cdots \phi_{i_{\sigma(N)}} \rangle_A = \text{sgn}(\sigma) | \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N} \rangle_A \quad (3.107)$$

$$| \phi_{i_1} \cdots a^{(0)} \phi_{i_\mu}^{(0)} + a^{(1)} \phi_{i_\mu}^{(1)} \cdots \phi_{i_N} \rangle_S = a^{(0)} | \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_\mu}^{(0)} \cdots \phi_{i_N} \rangle_S + a^{(1)} | \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_\mu}^{(1)} \cdots \phi_{i_N} \rangle_S \quad (3.108)$$

$$| \phi_{i_1} \cdots a^{(0)} \phi_{i_\mu}^{(0)} + a^{(1)} \phi_{i_\mu}^{(1)} \cdots \phi_{i_N} \rangle_A = a^{(0)} | \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_\mu}^{(0)} \cdots \phi_{i_N} \rangle_A + a^{(1)} | \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_\mu}^{(1)} \cdots \phi_{i_N} \rangle_A \quad (3.109)$$

◇

証明

まず基底状態について次のように展開できる.

$$|\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{i \in I} n_i!}} \text{per} \left[|\phi_{i_1}\rangle \quad \cdots \quad |\phi_{i_N}\rangle \right] \quad (3.110)$$

$$|\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \left[|\phi_{i_1}\rangle \quad \cdots \quad |\phi_{i_N}\rangle \right] \quad (3.111)$$

行列に関する性質より次のようになる.

$$\left| \phi_{i_{\sigma(1)}} \cdots \phi_{i_{\sigma(N)}} \right\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{i \in I} n_i!}} \text{per} \left[\left| \phi_{i_{\sigma(1)}} \right\rangle \quad \cdots \quad \left| \phi_{i_{\sigma(N)}} \right\rangle \right] \quad (3.112)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{i \in I} n_i!}} \sum_{\tau \in \mathfrak{S}_N} \left| \phi_{i_{\sigma\tau(1)}} \right\rangle \cdots \left| \phi_{i_{\sigma\tau(N)}} \right\rangle \quad (3.113)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{i \in I} n_i!}} \sum_{\tau \in \mathfrak{S}_N} \left| \phi_{i_{\tau(1)}} \right\rangle \cdots \left| \phi_{i_{\tau(N)}} \right\rangle \quad (3.114)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{i \in I} n_i!}} \text{per} \left[|\phi_{i_1}\rangle \quad \cdots \quad |\phi_{i_N}\rangle \right] \quad (3.115)$$

$$= |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S \quad (3.116)$$

$$\left| \phi_{i_{\sigma(1)}} \cdots \phi_{i_{\sigma(N)}} \right\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \left[\left| \phi_{i_{\sigma(1)}} \right\rangle \quad \cdots \quad \left| \phi_{i_{\sigma(N)}} \right\rangle \right] \quad (3.117)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\tau \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\tau) \left| \phi_{i_{\sigma\tau(1)}} \right\rangle \cdots \left| \phi_{i_{\sigma\tau(N)}} \right\rangle \quad (3.118)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\tau \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma) \text{sgn}(\tau) \left| \phi_{i_{\tau(1)}} \right\rangle \cdots \left| \phi_{i_{\tau(N)}} \right\rangle \quad (3.119)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{sgn}(\sigma) \det \left[|\phi_{i_1}\rangle \quad \cdots \quad |\phi_{i_N}\rangle \right] \quad (3.120)$$

$$= \text{sgn}(\sigma) |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_A \quad (3.121)$$

次に線形性について順当に計算する.

$$\left| \phi_{i_1} \cdots a^{(0)} \phi_{i_\mu}^{(0)} + a^{(1)} \phi_{i_\mu}^{(1)} \cdots \phi_{i_N} \right\rangle_S \quad (3.122)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{i \in I} n_i!}} \text{per} \left[\begin{array}{cccc} |\phi_{i_1}\rangle & \cdots & a^{(0)} |\phi_{i_\mu}^{(0)}\rangle + a^{(1)} |\phi_{i_\mu}^{(1)}\rangle & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle \end{array} \right] \quad (3.123)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{i \in I} n_i!}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \left| \phi_{i_{\sigma(1)}} \right\rangle \cdots \left(a^{(0)} |\phi_{i_\mu}^{(0)}\rangle + a^{(1)} |\phi_{i_\mu}^{(1)}\rangle \right) \cdots \left| \phi_{i_{\sigma(N)}} \right\rangle \quad (3.124)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{i \in I} n_i!}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \left(a^{(0)} |\phi_{i_{\sigma(1)}}\rangle \cdots |\phi_{i_\mu}^{(0)}\rangle \cdots |\phi_{i_{\sigma(N)}}\rangle + a^{(1)} |\phi_{i_{\sigma(1)}}\rangle \cdots |\phi_{i_\mu}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{i_{\sigma(N)}}\rangle \right) \quad (3.125)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{i \in I} n_i!}} \left(a^{(0)} \text{per} \left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_\mu}^{(0)}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \right] + a^{(1)} \text{per} \left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_\mu}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \right] \right) \quad (3.126)$$

$$= a^{(0)} \left| \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_\mu}^{(0)} \cdots \phi_{i_N} \right\rangle_S + a^{(1)} \left| \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_\mu}^{(1)} \cdots \phi_{i_N} \right\rangle_S \quad (3.127)$$

$$\left| \phi_{i_1} \cdots a^{(0)} \phi_{i_\mu}^{(0)} + a^{(1)} \phi_{i_\mu}^{(1)} \cdots \phi_{i_N} \right\rangle_A \quad (3.128)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \left[\begin{array}{cccc} |\phi_{i_1}\rangle & \cdots & a^{(0)} |\phi_{i_\mu}^{(0)}\rangle + a^{(1)} |\phi_{i_\mu}^{(1)}\rangle & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle \end{array} \right] \quad (3.129)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma) \left| \phi_{i_{\sigma(1)}} \right\rangle \cdots \left(a^{(0)} |\phi_{i_\mu}^{(0)}\rangle + a^{(1)} |\phi_{i_\mu}^{(1)}\rangle \right) \cdots \left| \phi_{i_{\sigma(N)}} \right\rangle \quad (3.130)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma) \left(a^{(0)} |\phi_{i_{\sigma(1)}}\rangle \cdots |\phi_{i_\mu}^{(0)}\rangle \cdots |\phi_{i_{\sigma(N)}}\rangle + a^{(1)} |\phi_{i_{\sigma(1)}}\rangle \cdots |\phi_{i_\mu}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{i_{\sigma(N)}}\rangle \right) \quad (3.131)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(a^{(0)} \det \left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_\mu}^{(0)}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \right] + a^{(1)} \det \left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_\mu}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \right] \right) \quad (3.132)$$

$$= a^{(0)} \left| \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_\mu}^{(0)} \cdots \phi_{i_N} \right\rangle_A + a^{(1)} \left| \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_\mu}^{(1)} \cdots \phi_{i_N} \right\rangle_A \quad (3.133)$$

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.

N 個の同一の Bose 粒子による Hilbert 空間は $\mathcal{H}_S^{(N)}$, また Fermi 粒子による Hilbert 空間は $\mathcal{H}_A^{(N)}$ となる.

5 計算練習

例 5.1 (Q21-25, Q21-26, Q21-27).

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.

$$\mathcal{H}_S^{(2)} = \text{span}\{|\alpha\rangle|\alpha\rangle\} \quad (5.1)$$

$$\mathcal{H}_A^{(2)} = \emptyset \quad (5.2)$$

$$\mathcal{H}_S^{(3)} = \text{span}\{|\alpha\rangle|\alpha\rangle|\alpha\rangle\} \quad (5.3)$$

$$\mathcal{H}_A^{(3)} = \emptyset \quad (5.4)$$

互いに異なる 2 つの 1 粒子状態 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}_{single}$ を持つ場合は次のようになる.

$$\mathcal{H}_S^{(2)} = \text{span}\left\{|\alpha\rangle|\alpha\rangle, |\beta\rangle|\beta\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle)\right\} \quad (5.5)$$

$$\mathcal{H}_A^{(2)} = \text{span}\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle)\right\} \quad (5.6)$$

$$\mathcal{H}_S^{(3)} = \text{span}\left\{|\alpha\rangle|\alpha\rangle|\alpha\rangle, |\beta\rangle|\beta\rangle|\beta\rangle, \right. \quad (5.7)$$

$$\left. \frac{1}{\sqrt{3}}(|\alpha\rangle|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\alpha\rangle|\beta\rangle|\alpha\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle|\alpha\rangle), \right. \quad (5.8)$$

$$\left. \frac{1}{\sqrt{3}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\beta\rangle|\alpha\rangle)\right\} \quad (5.9)$$

$$\mathcal{H}_A^{(3)} = \emptyset \quad (5.10)$$

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.

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle|\gamma\rangle + |\gamma\rangle|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\gamma\rangle|\alpha\rangle + |\gamma\rangle|\beta\rangle|\alpha\rangle + |\alpha\rangle|\gamma\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle|\gamma\rangle) \in \mathcal{H}_S^{(3)} \quad (5.11)$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle|\gamma\rangle + |\gamma\rangle|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\gamma\rangle|\alpha\rangle - |\gamma\rangle|\beta\rangle|\alpha\rangle - |\alpha\rangle|\gamma\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle|\gamma\rangle) \in \mathcal{H}_A^{(3)} \quad (5.12)$$

◇

6 Bose, Fermi 粒子系の量子状態の粒子数表示

Bose, Fermi 粒子系の正規直交基底は次のようにラベル付けされていた.

$$|\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S \quad (i_1, \dots, i_N \in I, i_1 \leq \cdots \leq i_N) \quad (6.1)$$

$$|\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_A \quad (i_1, \dots, i_N \in I, i_1 < \cdots < i_N). \quad (6.2)$$

これより粒子状態 $|\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S, |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_A$ 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.

$$\begin{aligned} n_i^{(s)} &\in \mathbb{Z}_{\geq 0}, & \sum_{i \in I} n_i^{(s)} &= N \\ n_i^{(a)} &\in \{0, 1\}, & \sum_{i \in I} n_i^{(a)} &= N. \end{aligned} \quad (6.3)$$

この粒子数を用いて状態を表現することを考える.

定義 (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.

$$|(n_i)_{i \in I}\rangle_S = |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle_S = |\underbrace{\phi_1 \phi_1 \cdots \phi_1}_{n_1} \underbrace{\phi_2 \phi_2 \cdots \phi_2}_{n_2} \cdots \underbrace{\phi_i \phi_i \cdots \phi_i}_{n_i} \cdots\rangle_S \quad (6.4)$$

$$|(n_i)_{i \in I}\rangle_A = |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle_A = |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_A. \quad (6.5)$$

これを粒子数表示または占有数表示という. Bose 粒子系か Fermi 粒子系かは文脈で分かる場合, 添字 S, A は省略できる.

命題 6.1.

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

証明

Bose, Fermi 粒子系の次の粒子数表示があったときに一意に正規直交基底が存在することを示す.

$$|(n_i)_{i \in I}\rangle_S \quad \left(n_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}, \sum_{i \in I} n_i = N \right) \quad (6.6)$$

$$|(n_i)_{i \in I}\rangle_A \quad \left(n_i \in \{0, 1\}, \sum_{i \in I} n_i = N \right) \quad (6.7)$$

Bose 粒子系の粒子数表示に対して正規直交基底の表現が存在することは定義から分かり, 昇順にソートされているので一意に $|\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S$ が定まる. Fermi 粒子系も同様. \square

定理 6.2.

N 個の Bose, Fermi 粒子系の状態の粒子数表示は正規直交基底となる. \diamond

証明

命題 6.1 より Bose, Fermi 粒子系の粒子数表示と正規直交基底が対応するから成り立つ.

$$\langle (n_i)_{i \in I} | (n'_i)_{i \in I} \rangle_S = \prod_{i \in I} \delta_{n_i n'_i} \quad (6.8)$$

$$\langle (n_i)_{i \in I} | (n'_i)_{i \in I} \rangle_A = \prod_{i \in I} \delta_{n_i n'_i} \quad (6.9)$$

$$\text{span} \left\{ |(n_i)_{i \in I}\rangle_S \mid n_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}, \sum_{i \in I} n_i = N \right\} = \mathcal{H}_S^{(N)} \quad (6.10)$$

$$\text{span} \left\{ |(n_i)_{i \in I}\rangle_A \mid n_i \in \{0, 1\}, \sum_{i \in I} n_i = N \right\} = \mathcal{H}_A^{(N)} \quad (6.11)$$

$$\sum_{n_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}, \sum_i n_i = N} |(n_i)_{i \in I}\rangle_S \langle (n_i)_{i \in I}|_S = \hat{1}_{\mathcal{H}_S^{(N)}} \quad (6.12)$$

$$\sum_{n_i \in \{0, 1\}, \sum_i n_i = N} |(n_i)_{i \in I}\rangle_A \langle (n_i)_{i \in I}|_A = \hat{1}_{\mathcal{H}_A^{(N)}} \quad (6.13)$$

\square

定義.

また全粒子数を固定しない Bose 粒子系の Hilbert 空間を \mathcal{H}_{Bose} と書き, 次のように定義する.

$$\mathcal{H}_{Bose} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_S^{(N)} \quad (6.14)$$

$$\mathcal{H}_{Fermi} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_A^{(N)} \quad (6.15)$$

定義から

$$N \neq N' \iff \mathcal{H}_S^{(N)} \perp \mathcal{H}_S^{(N')} \quad (6.16)$$

$$N \neq N' \iff \mathcal{H}_A^{(N)} \perp \mathcal{H}_A^{(N')} \quad (6.17)$$

定理 6.3.

一般の Bose, Fermi 粒子系について正規直交基底となる. \diamond

証明

全体粒子数が異なれば異なる粒子数が存在するから正規直交関係を満たし、それぞれの全粒子数の恒等演算子を和を取ることで恒等演算子となり、それぞれの全粒子数で生成する.

$$\langle (n_i)_{i \in I} | (n'_i)_{i \in I} \rangle_S = \prod_{i \in I} \delta_{n_i n'_i} \quad (6.18)$$

$$\langle (n_i)_{i \in I} | (n'_i)_{i \in I} \rangle_A = \prod_{i \in I} \delta_{n_i n'_i} \quad (6.19)$$

$$\sum_{n_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}} |(n_i)_{i \in I}\rangle_S \langle (n_i)_{i \in I}|_S = \hat{1}_{\mathcal{H}_{Bose}} \quad (6.20)$$

$$\sum_{n_i \in \{0,1\}} |(n_i)_{i \in I}\rangle_A \langle (n'_i)_{i \in I}|_A = \hat{1}_{\mathcal{H}_{Fermi}} \quad (6.21)$$

$$\mathcal{H}_{Bose} = \text{span}\{|(n_i)_{i \in I}\rangle_S \mid n_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}\} \quad (6.22)$$

$$\mathcal{H}_{Fermi} = \text{span}\{|(n_i)_{i \in I}\rangle_A \mid n_i \in \{0,1\}\} \quad (6.23)$$

□

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.

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.

$$\hat{a}_i \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{per} [|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] = \frac{1}{\sqrt{(N-1)!}} \sum_{\mu \in \mathbb{Z}_N, i_\mu = i} \text{per} [|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_{\mu-1}}\rangle \quad |\phi_{i_{\mu+1}}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] \quad (7.1)$$

$$\hat{a}_i^\dagger \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{per} [|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] = \frac{1}{\sqrt{(N+1)!}} \text{per} [|\phi_i\rangle \quad |\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] \quad (7.2)$$

その上で個数演算子 \hat{n}_i と全粒子数演算子 \hat{N} を次のように定義する.

$$\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad (7.3)$$

$$\hat{N} = \sum_{i \in I} \hat{n}_i \quad (7.4)$$

定理 7.1 (Q21-35, Q21-36).

Bose 粒子系の消滅演算子 \hat{a}_i と生成演算子 \hat{a}_i^\dagger について次の 2 式と定義は同値である.

$$\hat{a}_i |\dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i} |\dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (7.5)$$

$$\hat{a}_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |\dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad (7.6)$$

◇

証明

定義は $|\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S$ の粒子数 n_i を用いて次のようになる.

$$\hat{a}_i \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{j \in I} n_j!}} \text{per} [|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] = \frac{n_i}{\sqrt{(N-1)! \prod_{j \in I} n_j!}} \text{per} [|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_{\mu-1}}\rangle \quad |\phi_{i_{\mu+1}}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] \quad (7.7)$$

$$\hat{a}_i^\dagger \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{j \in I} n_j!}} \text{per} [|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] = \frac{1}{\sqrt{(N+1)! \prod_{j \in I} n_j!}} \text{per} [|\phi_i\rangle \quad |\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] \quad (7.8)$$

Bose 粒子系の粒子数表示は次のように展開できる.

$$|\dots, n_i, \dots\rangle = |\phi_{i_1}, \dots, \phi_{i_N}\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{j \in I} n_j!}} \text{per} [|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] \quad (7.9)$$

これより定義と次の式は同値である.

$$\hat{a}_i |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S = \sqrt{n_i} |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_{\mu-1}} \phi_{i_{\mu+1}} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S \quad (7.10)$$

$$\hat{a}_i^\dagger |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S = \sqrt{n_i + 1} |\phi_i \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S \quad (7.11)$$

よって次の式は同値である.

$$\hat{a}_i |\dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i} |\dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (7.12)$$

$$\hat{a}_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |\dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad (7.13)$$

□

命題 7.2 (Q21-37).

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 の交換関係は次のようになる.

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0 \quad (7.14)$$

◇

証明

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

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} \hat{a}_i |\dots, n_i + 1, \dots\rangle = (n_i + 1) |\dots, n_i, \dots\rangle \quad (7.15)$$

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i |\dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i} \hat{a}_i^\dagger |\dots, n_i - 1, \dots\rangle = n_i |\dots, n_i, \dots\rangle \quad (7.16)$$

よりそれぞれの交換関係は次のようになる.

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger] = \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = (n_i + 1) - n_i = 1 \quad (7.17)$$

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_i] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i^\dagger] = 0 \quad (7.18)$$

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

$$\hat{a}_i \hat{a}_j |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle = \sqrt{n_i n_j} |\dots, n_i - 1, \dots, n_j - 1, \dots\rangle \quad (7.19)$$

$$\hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle = \sqrt{n_i (n_j + 1)} |\dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots\rangle \quad (7.20)$$

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle = \sqrt{(n_i + 1) n_j} |\dots, n_i + 1, \dots, n_j - 1, \dots\rangle \quad (7.21)$$

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle = \sqrt{(n_i + 1)(n_j + 1)} |\dots, n_i + 1, \dots, n_j + 1, \dots\rangle \quad (7.22)$$

よりそれぞれの交換関係は次のようになる.

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i = 0 \quad (7.23)$$

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = \hat{a}_i \hat{a}_j - \hat{a}_j \hat{a}_i = 0 \quad (7.24)$$

$$[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger = 0 \quad (7.25)$$

よって示された. □

命題 7.3 (Q21-38).

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 は互いに Hermite 共役である. ◇

証明

計算することで次式が成り立つ.

$$\langle \dots, n_i - 1, \dots | \hat{a}_i | \dots, n_i, \dots \rangle = \langle \dots, n_i, \dots | \hat{a}_i^\dagger | \dots, n_i - 1, \dots \rangle = \sqrt{n_i} \quad (7.26)$$

$$\langle (n_i)_{i \in I} | \hat{a}_i | (n'_i)_{i \in I} \rangle = \langle (n'_i)_{i \in I} | \hat{a}_i^\dagger | (n_i)_{i \in I} \rangle = 0 \quad (otherwise) \quad (7.27)$$

よって $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ は互いに Hermite 共役である. □

命題 7.4 (Q21-39).

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.

$$\hat{n}_i^\dagger = (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i)^\dagger = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \hat{n}_i \quad (7.28)$$

$$\hat{n}_i |\dots, n_i, \dots\rangle = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i |\dots, n_i, \dots\rangle = n_i |\dots, n_i, \dots\rangle \quad (7.29)$$

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.

$$\hat{N}^\dagger = \sum_{i \in I} \hat{n}_i^\dagger = \sum_{i \in I} \hat{n}_i = \hat{N} \quad (7.30)$$

$$\hat{N} |(n_i)_{i \in I}\rangle = \sum_{i \in I} \hat{n}_i |(n_i)_{i \in I}\rangle = \sum_{i \in I} n_i |(n_i)_{i \in I}\rangle = N |(n_i)_{i \in I}\rangle \quad (7.31)$$

□

定理 7.5 (Q21-41).

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.

$$(\hat{a}_i)^\dagger = \hat{a}_i^\dagger, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0, \quad \hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = n_i \quad (7.32)$$

◇

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.

$$\hat{n}_i \hat{a}_i = (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i) \hat{a}_i = (\hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger - 1) \hat{a}_i = (n_i - 1) \hat{a}_i \quad (7.33)$$

$$\hat{n}_i \hat{a}_i^\dagger = \hat{a}_i^\dagger (\hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger) = \hat{a}_i^\dagger (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + 1) = (n_i + 1) \hat{a}_i^\dagger \quad (7.34)$$

$$\hat{n}_j \hat{a}_i = \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i = \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j = n_j \hat{a}_i \quad (i \neq j) \quad (7.35)$$

$$\hat{n}_j \hat{a}_i^\dagger = \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j = n_j \hat{a}_i^\dagger \quad (i \neq j) \quad (7.36)$$

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

$$\langle \dots, n_i - 1, \dots | \hat{a}_i | \dots, n_i, \dots \rangle = \langle \dots, n_i, \dots | \hat{a}_i^\dagger | \dots, n_i - 1, \dots \rangle \quad (7.37)$$

$$n_i = \langle \dots, n_i, \dots | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i | \dots, n_i, \dots \rangle \quad (7.38)$$

であるから次のようになる.

$$\hat{a}_i |\dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i} |\dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (7.39)$$

$$\hat{a}_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |\dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad (7.40)$$

これらの式から定理 7.1 より定義を導ける.

□

命題 7.6.

真空状態 $|\text{vac}\rangle$ を次のように定義する.

$$|\text{vac}\rangle = |0, 0, 0, \dots\rangle \quad (7.41)$$

このとき次のような性質が認められる.

$$\hat{a}_i |\text{vac}\rangle = 0 \quad (7.42)$$

$$\langle \text{vac} | \text{vac} \rangle = 1 \quad (7.43)$$

$$|(n_i)_{i \in I}\rangle = \prod_{i \in I} \frac{(\hat{a}_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |\text{vac}\rangle \quad (7.44)$$

◇

証明

それぞれ定義を展開することで導かれる.

$$\hat{a}_i |\text{vac}\rangle = \hat{a}_i |0, 0, \dots\rangle = 0 \quad (7.45)$$

$$\langle \text{vac} | \text{vac} \rangle = \langle 0, 0, \dots | 0, 0, \dots \rangle = \prod_{i \in I} \delta_{0,0} = 1 \quad (7.46)$$

$$|(n_i)_{i \in I}\rangle = \prod_{i \in I} \frac{(\hat{a}_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |0, 0, \dots\rangle = \prod_{i \in I} \frac{(\hat{a}_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |\text{vac}\rangle \quad (7.47)$$

□

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.

$$\hat{c}_i \frac{1}{\sqrt{N!}} \det [|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] = \begin{cases} \frac{(-1)^\mu}{\sqrt{(N-1)!}} \det [|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_{\mu-1}}\rangle |\phi_{i_{\mu+1}}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] & (n_i = 1) \\ 0 & (n_i = 0) \end{cases} \quad (8.1)$$

$$\hat{c}_i^\dagger \frac{1}{\sqrt{N!}} \det [|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] = \frac{1}{\sqrt{(N+1)!}} \det [|\phi_i\rangle \quad |\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] \quad (8.2)$$

$$\hat{n}_i = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \quad (8.3)$$

$$\hat{N} = \sum_{i \in I} \hat{n}_i \quad (8.4)$$

定理 8.1 (Q21-50, 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.

$$\hat{c}_i |\dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} n_i |\dots, 1 - n_i, \dots\rangle \quad (8.5)$$

$$\hat{c}_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} (1 - n_i) |\dots, 1 - n_i, \dots\rangle \quad (8.6)$$

◇

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.

$$\hat{c}_i \frac{1}{\sqrt{N!}} \det [|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] = \frac{(-1)^\mu}{\sqrt{(N-1)!}} n_i \det [|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_{\mu-1}}\rangle |\phi_{i_{\mu+1}}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] \quad (8.7)$$

$$\hat{c}_i^\dagger \frac{1}{\sqrt{N!}} \det [|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] = \frac{1}{\sqrt{(N+1)!}} \det [|\phi_i\rangle \quad |\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] \quad (8.8)$$

Fermi 粒子系の粒子数表示は次のように展開できる.

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det [|\phi_{i_1}\rangle \quad \cdots \quad |\phi_{i_N}\rangle] \quad (8.9)$$

これより定義と次の式は同値である.

$$\hat{c}_i |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle = (-1)^\mu n_i |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_{\mu-1}} \phi_{i_{\mu+1}} \cdots \phi_{i_N}\rangle_A \quad (8.10)$$

$$\hat{c}_i^\dagger |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle = |\phi_i \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_A \quad (8.11)$$

よって次の式は同値である.

$$\hat{c}_i |\dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} n_i |\dots, 1 - n_i, \dots\rangle \quad (8.12)$$

$$\hat{c}_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} (1 - n_i) |\dots, 1 - n_i, \dots\rangle \quad (8.13)$$

□

定理 8.2 (Q21-52).

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.

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \quad \{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = \{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger\} = 0 \quad (8.14)$$

◇

証明

$$\hat{c}_i |\dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} n_i |\dots, 0, \dots\rangle \quad (8.15)$$

$$\hat{c}_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} (1 - n_i) |\dots, 1, \dots\rangle \quad (8.16)$$

$$\hat{c}_i \hat{c}_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle = (1 - n_i) |\dots, 0, \dots\rangle \quad (8.17)$$

$$\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i |\dots, n_i, \dots\rangle = n_i |\dots, 1, \dots\rangle \quad (8.18)$$

$$\hat{c}_i \hat{c}_i |\dots, n_i, \dots\rangle = 0 \quad (8.19)$$

$$\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle = 0 \quad (8.20)$$

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_i^\dagger\} = 1, \quad \{\hat{c}_i, \hat{c}_i\} = \{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_i^\dagger\} = 0 \quad (8.21)$$

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.

$$\hat{c}_i \hat{c}_j^\dagger |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{k=i}^{j-1} n_k} n_i (1 - n_j) |\dots, 1 - n_i, \dots, 1 - n_j, \dots\rangle \quad (8.22)$$

$$\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle = (-1)^{1 + \sum_{k=i}^{j-1} n_k} n_i (1 - n_j) |\dots, 1 - n_i, \dots, 1 - n_j, \dots\rangle \quad (8.23)$$

$$\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{k=i}^{j-1} n_k} (1 - n_i) n_j |\dots, 1 - n_i, \dots, 1 - n_j, \dots\rangle \quad (8.24)$$

$$\hat{c}_j \hat{c}_i^\dagger |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle = (-1)^{1 + \sum_{k=i}^{j-1} n_k} (1 - n_i) n_j |\dots, 1 - n_i, \dots, 1 - n_j, \dots\rangle \quad (8.25)$$

$$\hat{c}_i \hat{c}_j |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{k=i}^{j-1} n_k} n_i n_j |\dots, 1 - n_i, \dots, 1 - n_j, \dots\rangle \quad (8.26)$$

$$\hat{c}_j \hat{c}_i |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle = (-1)^{1 + \sum_{k=i}^{j-1} n_k} n_i n_j |\dots, 1 - n_i, \dots, 1 - n_j, \dots\rangle \quad (8.27)$$

$$\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{k=i}^{j-1} n_k} (1 - n_i) (1 - n_j) |\dots, 1 - n_i, \dots, 1 - n_j, \dots\rangle \quad (8.28)$$

$$\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i^\dagger |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle = (-1)^{1 + \sum_{k=i}^{j-1} n_k} (1 - n_i) (1 - n_j) |\dots, 1 - n_i, \dots, 1 - n_j, \dots\rangle \quad (8.29)$$

$\{A, B\} = \{B, A\}$ 次の反交換関係が求まる.

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\} = \{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = \{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger\} = 0 \quad (i \neq j) \quad (8.30)$$

□

命題 8.3.

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

$$\langle n'_1, \dots, n'_i, \dots | \hat{c}_i^\dagger | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} \langle n'_1, \dots, n'_i, \dots | n_1, \dots, n_i + 1, \dots \rangle \quad (8.31)$$

$$= (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} \delta_{n_1 n'_1} \cdots \delta_{n_{i-1} n'_{i-1}} \delta_{n_i + 1 n'_i} \delta_{n_{i+1} n'_{i+1}} \cdots \quad (8.32)$$

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots | \hat{c}_i | n'_1, \dots, n'_i, \dots \rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n'_j} \langle n_1, \dots, n_i, \dots | n'_1, \dots, n'_i - 1, \dots \rangle \quad (8.33)$$

$$= (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n'_j} \delta_{n_1 n'_1} \cdots \delta_{n_{i-1} n'_{i-1}} \delta_{n_i + 1 n'_i} \delta_{n_{i+1} n'_{i+1}} \cdots \quad (8.34)$$

より Hermite 共役である. □

命題 8.4.

$$\hat{n}_i^\dagger = \hat{n}_i, \hat{n}_i |\dots, n_i, \dots\rangle = n_i |\dots, n_i, \dots\rangle \quad (8.35)$$

$$\hat{N}^\dagger = \hat{N}, \hat{N} |(n_i)_{i \in I}\rangle = N |(n_i)_{i \in I}\rangle \quad (8.36)$$

◇

証明

$$\hat{n}_i^\dagger = (\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i)^\dagger = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i = \hat{n}_i \quad (8.37)$$

$$\hat{N}^\dagger = \sum_{i \in I} \hat{n}_i^\dagger = \sum_{i \in I} \hat{n}_i = \hat{N} \quad (8.38)$$

$$\hat{n}_i |\dots, n_i, \dots\rangle = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i |\dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{2 \sum_{j=1}^{i-1} n_j} n_i^2 |\dots, n_i, \dots\rangle = n_i |\dots, n_i, \dots\rangle \quad (8.39)$$

$$\hat{N} |(n_i)_{i \in I}\rangle = \sum_{i \in I} \hat{n}_i |(n_i)_{i \in I}\rangle = \sum_{i \in I} n_i |(n_i)_{i \in I}\rangle = N |(n_i)_{i \in I}\rangle \quad (8.40)$$

□

命題 8.5.

$$|\text{vac}\rangle = |0, 0, \dots\rangle \quad (8.41)$$

$$\hat{c}_i |\text{vac}\rangle = 0 \quad (8.42)$$

$$\langle \text{vac} | \text{vac} \rangle = 1 \quad (8.43)$$

◇

証明

□

9 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

定義 (m 粒子演算子).

Hilbert 空間 $\mathcal{H}^{(m)}$ において粒子交換に関して対称な演算子を m 粒子演算子と呼ぶ. このとき m 粒子演算子 \hat{f} を Hilbert 空間 $\mathcal{H}^{(N)}$ の粒子 μ_1, \dots, μ_m に対して埋め込んだ演算子を $\hat{f}_{\mu_1 \dots \mu_m}$ と書く. そして m 粒子演算子の粒子対に関する和 \hat{f}^{tot} を次のように定義する.

$$\hat{f}^{\text{tot}} = \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_1 < \dots < \mu_m}} \hat{f}_{\mu_1 \dots \mu_m} \quad (9.1)$$

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.

$$|i_1 \dots i_N\rangle = |\phi_{i_1}\rangle \dots |\phi_{i_N}\rangle \quad (9.2)$$

定理 9.1.

m 粒子演算子について次のような性質が認められる.

$$\hat{f}^{\text{tot}} = \hat{P}(\sigma) \hat{f}^{\text{tot}} \hat{P}^\dagger(\sigma) \quad (9.3)$$

$$\hat{f}^{\text{tot}} = \frac{1}{m!} \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_n \neq \mu_{n'}}} \hat{f}_{\mu_1 \dots \mu_m} \quad (9.4)$$

◇

証明

置換に関して対称な演算子であるから μ_1, \dots, μ_m 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.

$$\langle i_1 \dots i_N | \hat{P}(\sigma) \hat{f}^{\text{tot}} \hat{P}^\dagger(\sigma) | j_1 \dots j_N \rangle = \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_1 < \dots < \mu_m}} \langle i_{\sigma(1)} \dots i_{\sigma(N)} | \hat{f}_{\mu_1 \dots \mu_m} | j_{\sigma(1)} \dots j_{\sigma(N)} \rangle \quad (9.5)$$

$$= \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_1 < \dots < \mu_m}} \langle i_1 \dots i_N | \hat{f}_{\mu_1 \dots \mu_m} | j_1 \dots j_N \rangle \quad (9.6)$$

$$= \langle i_1 \dots i_N | \hat{f}^{\text{tot}} | j_1 \dots j_N \rangle \quad (9.7)$$

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.

$$\hat{f}^{\text{tot}} = \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_1 < \dots < \mu_m}} \hat{f}_{\mu_1 \dots \mu_m} = \frac{1}{m!} \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_n \neq \mu_{n'}}} \hat{f}_{\mu_1 \dots \mu_m} \quad (9.8)$$

□

例 9.2.

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.

$$\hat{h} = \hat{P}(\sigma) \hat{h} \hat{P}^\dagger(\sigma) \quad (9.9)$$

$$\hat{v} = \hat{P}(\sigma) \hat{v} \hat{P}^\dagger(\sigma). \quad (9.10)$$

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

$$\langle ji|v|lk\rangle = \langle ji|\hat{E}\hat{v}\hat{E}^\dagger|lk\rangle = \langle ij|v|kl\rangle \quad (9.11)$$

となる.

◇

例 9.3.

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}^{tot} と 2 粒子演算子の粒子対に関する和 \hat{v}^{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 m_e 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 個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. $\hat{H} = \hat{h}^{\text{tot}} + \hat{v}^{\text{tot}}$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \sum_{\mu=1}^N \hat{\mathbf{p}}_\mu^2 - Ze^2 \sum_{\mu=1}^N \frac{1}{|\hat{\mathbf{r}}_\mu|} + e^2 \sum_{1 \leq \mu < \nu \leq N} \frac{1}{|\hat{\mathbf{r}}_\mu - \hat{\mathbf{r}}_\nu|} + \frac{e}{2m_e c} (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \cdot \mathbf{B} + \frac{e^2}{8m_e c^2} \sum_{\mu=1}^N (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{r}}_\mu)^2 \quad (9.12)$$

$$\hat{h}_\mu = \frac{1}{2m_e} \hat{\mathbf{p}}_\mu^2 - \frac{Ze^2}{|\hat{\mathbf{r}}_\mu|} + \frac{e}{2m_e c} (\hat{\mathbf{l}}_\mu + 2\hat{\mathbf{s}}_\mu) \cdot \mathbf{B} + \frac{e^2}{8m_e c^2} (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{r}}_\mu)^2 \quad (9.13)$$

$$\hat{v}_{\mu\nu} = \frac{e^2}{|\hat{\mathbf{r}}_\mu - \hat{\mathbf{r}}_\nu|} \quad (9.14)$$

◇

10 ここからジャンプした方が良いでしょう。あるいは、ここで十分では。

11 Bose 粒子系における m 粒子演算子の和の粒子数表示

2 粒子演算子において α, β の定義がよろしくないのをそれを修正するのに加えて 1, 2 粒子演算子の両方を示すことにしました。

定理 11.1.

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

$$\hat{f}^{\text{tot}} = \sum_{j_1, \dots, j_m, k_1, \dots, k_m \in I} \langle j_1 \cdots j_m | f | k_1 \cdots k_m \rangle \hat{a}_{j_1}^\dagger \cdots \hat{a}_{j_m}^\dagger \hat{a}_{k_1} \cdots \hat{a}_{k_m} \quad (11.1)$$

◇

証明

m 粒子演算子を N 個の Bose 粒子系の Hilbert 空間 $\mathcal{H}_S^{(N)}$ の正規直交基底 $|\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S$ に適用する。

$$\hat{f}^{\text{tot}} |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{i \in I} n_i!}} \hat{f}^{\text{tot}} \text{per} [|i_1\rangle \cdots |i_N\rangle] \quad (11.2)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{i \in I} n_i!}} \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_1 < \cdots < \mu_m}} \hat{f}_{\mu_1 \cdots \mu_m} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \hat{P}^\dagger(\sigma) |i_1 \cdots i_{\mu_n} \cdots i_N\rangle \quad (11.3)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{i \in I} n_i!}} \frac{1}{m!} \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_n \neq \mu_{n'}}} \hat{f}_{\mu_1 \cdots \mu_m} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \hat{P}^\dagger(\sigma) |i_1 \cdots i_{\mu_n} \cdots i_N\rangle \quad (11.4)$$

ここで単位演算子の分解をして m 粒子演算子の基底への適用は次のように変形できる。

$$\hat{f} |k_1 \cdots k_m\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_m \in I} |j_1 \cdots j_m\rangle \langle j_1 \cdots j_m | f | k_1 \cdots k_m \rangle \quad (11.5)$$

これを用いて展開すると次のように変形できる.

$$\sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_n \neq \mu_{n'}}} \hat{f}_{\mu_1 \dots \mu_m} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \hat{P}^\dagger(\sigma) |i_1 \dots i_{\mu_n} \dots i_N\rangle \quad (11.6)$$

$$= \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_n \neq \mu_{n'}}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \sum_{j_1, \dots, j_m \in I} |j_1 \dots j_m\rangle \langle j_1 \dots j_m | \hat{f}_{\mu_1 \dots \mu_m} |i_{\sigma(1)} \dots i_{\sigma(\mu_n)} \dots i_{\sigma(N)}\rangle \quad (11.7)$$

$$= \sum_{j_1, \dots, j_m \in I} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_n \neq \mu_{n'}}} \langle j_1 \dots j_m | f | i_{\sigma(\mu_1)} \dots i_{\sigma(\mu_m)} \rangle |i_{\sigma(1)} \dots \underbrace{j_n}_{\mu_n} \dots i_{\sigma(N)}\rangle \quad (11.8)$$

$$= \sum_{\substack{j_1, \dots, j_m \in I \\ k_1, \dots, k_m \in I}} \langle j_1 \dots j_m | f | k_1 \dots k_m \rangle \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_n \neq \mu_{n'} \\ i_{\sigma(\mu_n)} = k_n}} \hat{P}^\dagger(\sigma) |i_1 \dots \underbrace{j_n}_{\sigma(\mu_n)} \dots i_N\rangle \quad (11.9)$$

そして総和の変数を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.

$$\sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_n \neq \mu_{n'} \\ i_{\sigma(\mu_n)} = k_n}} \hat{P}^\dagger(\sigma) |i_1 \dots \underbrace{j_n}_{\sigma(\mu_n)} \dots i_N\rangle = \sum_{\substack{\alpha_1, \dots, \alpha_m \in X \\ i_{\alpha_n} = k_n \\ \alpha_n \neq \alpha_{n'}}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \hat{P}^\dagger(\sigma) |i_1 \dots \underbrace{j_n}_{\alpha_n} \dots i_N\rangle \quad (11.10)$$

$$= \sum_{\substack{i_{\alpha_n} = k_n \\ \alpha_n \neq \alpha_{n'}}} \text{per} [|i_1\rangle \dots \underbrace{|j_n\rangle}_{\alpha_n} \dots |i_N\rangle] \quad (11.11)$$

次に消滅, 生成演算子 $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ の定義は次のようなものであった.

$$\hat{a}_i \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{per} [|i_1\rangle \dots |i_N\rangle] = \frac{1}{\sqrt{(N-1)!}} \sum_{\mu \in X, i_\mu = i} \text{per} [|i_1\rangle \dots |i_{\mu-1}\rangle \quad |i_{\mu+1}\rangle \dots |i_N\rangle] \quad (11.12)$$

$$\hat{a}_i^\dagger \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{per} [|i_1\rangle \dots |i_N\rangle] = \frac{1}{\sqrt{(N+1)!}} \text{per} [|i\rangle \quad |i_1\rangle \dots |i_N\rangle] \quad (11.13)$$

これより次のように変形できる.

$$\sqrt{N!} \sum_{\substack{i_{\alpha_n} = k_n \\ \alpha_n \neq \alpha_{n'}}} \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{per} [|i_1\rangle \dots |i_{\alpha_n-1}\rangle \quad |j_n\rangle \quad |i_{\alpha_n+1}\rangle \dots |i_N\rangle] \quad (11.14)$$

$$= \sqrt{N!} \sum_{\substack{i_{\alpha_n} = k_n \\ \alpha_n \neq \alpha_{n'}}} \hat{a}_{j_1}^\dagger \dots \hat{a}_{j_m}^\dagger \frac{1}{\sqrt{(N-m)!}} \text{per} [|i_1\rangle \dots |i_{\alpha_n-1}\rangle \quad |i_{\alpha_n+1}\rangle \dots |i_N\rangle] \quad (11.15)$$

$$= \sqrt{N!} \hat{a}_{j_1}^\dagger \dots \hat{a}_{j_m}^\dagger \hat{a}_{k_1} \dots \hat{a}_{k_m} \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{per} [|i_1\rangle \dots |i_{\alpha_n-1}\rangle \quad |i_{\alpha_n}\rangle \quad |i_{\alpha_n+1}\rangle \dots |i_N\rangle] \quad (11.16)$$

$$= \hat{a}_{j_1}^\dagger \dots \hat{a}_{j_m}^\dagger \hat{a}_{k_1} \dots \hat{a}_{k_m} \text{per} [|i_1\rangle \dots |i_N\rangle] \quad (11.17)$$

これより $\mathcal{H}_S^{(N)}$ における m 粒子演算子は次のように表現できる.

$$\hat{f}^{\text{tot}}|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S = \frac{1}{m!} \sum_{\substack{j_1,\dots,j_m \in I \\ k_1,\dots,k_m \in I}} \langle j_1 \cdots j_m | f | k_1 \cdots k_m \rangle \hat{a}_{j_1}^\dagger \cdots \hat{a}_{j_m}^\dagger \hat{a}_{k_1} \cdots \hat{a}_{k_m} |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S \quad (11.18)$$

さらに全粒子数 N の Hilbert 空間における m 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.

$$\hat{f}^{\text{tot}} = \frac{1}{m!} \sum_{\substack{j_1,\dots,j_m \in I \\ k_1,\dots,k_m \in I}} \langle j_1 \cdots j_m | f | k_1 \cdots k_m \rangle \hat{a}_{j_1}^\dagger \cdots \hat{a}_{j_m}^\dagger \hat{a}_{k_1} \cdots \hat{a}_{k_m} \quad (11.19)$$

□

例 11.2.

Bose 粒子系

$$\hat{h}^{\text{tot}} = \sum_{i,j \in I} \langle i | h | j \rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \quad (11.20)$$

◇

12 Bose 粒子系における 1 粒子演算子の和の粒子数表示

命題 12.1.

$$\hat{h}^{\text{tot}} \text{per} [|\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle] = \sum_{\nu=1}^N \text{per} [|\psi_1\rangle \cdots \hat{h}|\psi_\nu\rangle \cdots |\psi_N\rangle] \quad (12.1)$$

◇

証明

$$\hat{h}^{\text{tot}} \text{per} [|\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle] = \sum_{\mu=1}^N \hat{h}_\mu \text{per} [|\psi_1\rangle \cdots |\psi_N\rangle] \quad (12.2)$$

$$= \sum_{\mu=1}^N \hat{h}_\mu \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} |\psi_{\sigma(1)}\rangle \cdots |\psi_{\sigma(N)}\rangle \quad (12.3)$$

$$= \sum_{\mu=1}^N \hat{h}_\mu \sum_{\nu=1}^N \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N, \sigma(\nu)=\mu} |\psi_{\sigma(1)}\rangle \cdots |\psi_{\sigma(\nu)}\rangle \cdots |\psi_{\sigma(N)}\rangle \quad (12.4)$$

$$= \sum_{\nu=1}^N \sum_{\mu=1}^N \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N, \sigma(\nu)=\mu} |\psi_{\sigma(1)}\rangle \cdots \hat{h} |\psi_{\sigma(\nu)}\rangle \cdots |\psi_{\sigma(N)}\rangle \quad (12.5)$$

$$= \sum_{\nu=1}^N \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} |\psi_{\sigma(1)}\rangle \cdots \hat{h} |\psi_{\sigma(\nu)}\rangle \cdots |\psi_{\sigma(N)}\rangle \quad (12.6)$$

$$= \sum_{\nu=1}^N \text{per} [|\psi_1\rangle \cdots \hat{h} |\psi_\nu\rangle \cdots |\psi_N\rangle] \quad (12.7)$$

これより総和部分について次のように変形できる.

$$\sum_{\mu \in X} \text{per} [|\phi_{i_1}\rangle \cdots \hat{h} |\phi_{i_\mu}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] = \sum_{\mu \in X} \text{per} [|\phi_{i_1}\rangle \cdots \sum_{i \in I} |\phi_i\rangle \langle i | h | i_\mu \rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] \quad (12.8)$$

$$= \sum_{i \in I} \sum_{\mu \in X} \text{per} [|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_i\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] \langle i | h | i_\mu \rangle \quad (12.9)$$

$$= \sum_{i, j \in I} \langle i | h | j \rangle \sum_{\mu \in X, i_\mu=j} \text{per} [|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_i\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle] \quad (12.10)$$

□

13 Fermi 粒子系における m 粒子演算子の和の粒子数表示

定理 13.1.

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

$$\hat{f}^{\text{tot}} = \sum_{j_1, \dots, j_m, k_1, \dots, k_m \in I} \langle j_1 \cdots j_m | f | k_1 \cdots k_m \rangle \hat{c}_{j_1}^\dagger \cdots \hat{c}_{j_m}^\dagger \hat{c}_{k_1} \cdots \hat{c}_{k_m} \quad (13.1)$$

◇

証明

m 粒子演算子を N 個の Fermi 粒子系の Hilbert 空間 $\mathcal{H}_A^{(N)}$ の正規直交基底 $|\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_A$ に適用する.

$$\hat{f}^{\text{tot}}|\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{f}^{\text{tot}} \det [|i_1\rangle \cdots |i_N\rangle] \quad (13.2)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \frac{1}{m!} \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_n \neq \mu_{n'}}} \hat{f}_{\mu_1 \cdots \mu_m} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma) \hat{P}^\dagger(\sigma) |i_1 \cdots i_{\mu_n} \cdots i_N\rangle \quad (13.3)$$

ここで単位演算子の分解をして m 粒子演算子の基底への適用は次のように変形できる.

$$\hat{f}|k_1 \cdots k_m\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_m \in I} |j_1 \cdots j_m\rangle \langle j_1 \cdots j_m | \hat{f} |k_1 \cdots k_m\rangle \quad (13.4)$$

これを用いて展開すると次のように変形できる.

$$\sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_n \neq \mu_{n'}}} \hat{f}_{\mu_1 \cdots \mu_m} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma) \hat{P}^\dagger(\sigma) |i_1 \cdots i_{\mu_n} \cdots i_N\rangle \quad (13.5)$$

$$= \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_n \neq \mu_{n'}}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma) \sum_{j_1, \dots, j_m \in I} |j_1 \cdots j_m\rangle \langle j_1 \cdots j_m | \hat{f}_{\mu_1 \cdots \mu_m} |i_{\sigma(1)} \cdots i_{\sigma(\mu_n)} \cdots i_{\sigma(N)}\rangle \quad (13.6)$$

$$= \sum_{j_1, \dots, j_m \in I} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma) \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_n \neq \mu_{n'}}} \langle j_1 \cdots j_m | \hat{f} |i_{\sigma(\mu_1)} \cdots i_{\sigma(\mu_m)}\rangle |i_{\sigma(1)} \cdots \underbrace{j_n}_{\mu_n} \cdots i_{\sigma(N)}\rangle \quad (13.7)$$

$$= \sum_{\substack{j_1, \dots, j_m \in I \\ k_1, \dots, k_m \in I}} \langle j_1 \cdots j_m | \hat{f} |k_1 \cdots k_m\rangle \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma) \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_n \neq \mu_{n'} \\ i_{\sigma(\mu_n)} = k_n}} \hat{P}^\dagger(\sigma) |i_1 \cdots \underbrace{j_n}_{\sigma(\mu_n)} \cdots i_N\rangle \quad (13.8)$$

そして総和の変数を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.

$$\sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_m \in X \\ \mu_n \neq \mu_{n'} \\ i_{\sigma(\mu_n)} = k_n}} \hat{P}^\dagger(\sigma) |i_1 \cdots \underbrace{j_n}_{\sigma(\mu_n)} \cdots i_N\rangle = \sum_{\substack{\alpha_1, \dots, \alpha_m \in X \\ i_{\alpha_n} = k_n \\ \alpha_n \neq \alpha_{n'}}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \hat{P}^\dagger(\sigma) |i_1 \cdots \underbrace{j_n}_{\alpha_n} \cdots i_N\rangle \quad (13.9)$$

$$= \sum_{\substack{i_{\alpha_n} = k_n \\ \alpha_n \neq \alpha_{n'}}} \text{per} [|i_1\rangle \cdots \underbrace{|j_n\rangle}_{\alpha_n} \cdots |i_N\rangle] \quad (13.10)$$

次に消滅, 生成演算子 $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ の定義は次のようなものであった.

$$\hat{a}_i \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{per} [|i_1\rangle \cdots |i_N\rangle] = \frac{1}{\sqrt{(N-1)!}} \sum_{\mu \in X, i_\mu = i} \text{per} [|i_1\rangle \cdots |i_{\mu-1}\rangle \quad |i_{\mu+1}\rangle \cdots |i_N\rangle] \quad (13.11)$$

$$\hat{a}_i^\dagger \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{per} [|i_1\rangle \cdots |i_N\rangle] = \frac{1}{\sqrt{(N+1)!}} \text{per} [|i\rangle \quad |i_1\rangle \cdots |i_N\rangle] \quad (13.12)$$

これより次のように変形できる.

$$\sqrt{N!} \sum_{\substack{i_{\alpha_n}=k_n \\ \alpha_n \neq \alpha_{n'}}} \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{per}[|i_1\rangle \cdots |i_{\alpha_n-1}\rangle |j_n\rangle |i_{\alpha_n+1}\rangle \cdots |i_N\rangle] \quad (13.13)$$

$$= \sqrt{N!} \sum_{\substack{i_{\alpha_n}=k_n \\ \alpha_n \neq \alpha_{n'}}} \hat{a}_{j_1}^\dagger \cdots \hat{a}_{j_m}^\dagger \frac{1}{\sqrt{(N-m)!}} \text{per}[|i_1\rangle \cdots |i_{\alpha_n-1}\rangle |i_{\alpha_n+1}\rangle \cdots |i_N\rangle] \quad (13.14)$$

$$= \sqrt{N!} \hat{a}_{j_1}^\dagger \cdots \hat{a}_{j_m}^\dagger \hat{a}_{k_1} \cdots \hat{a}_{k_m} \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{per}[|i_1\rangle \cdots |i_{\alpha_n-1}\rangle |i_{\alpha_n}\rangle |i_{\alpha_n+1}\rangle \cdots |i_N\rangle] \quad (13.15)$$

$$= \hat{a}_{j_1}^\dagger \cdots \hat{a}_{j_m}^\dagger \hat{a}_{k_1} \cdots \hat{a}_{k_m} \text{per}[|i_1\rangle \cdots |i_N\rangle] \quad (13.16)$$

これより $\mathcal{H}_S^{(N)}$ における m 粒子演算子は次のように表現できる.

$$\hat{f}^{\text{tot}} |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S = \frac{1}{m!} \sum_{\substack{j_1, \dots, j_m \in I \\ k_1, \dots, k_m \in I}} \langle j_1 \cdots j_m | f | k_1 \cdots k_m \rangle \hat{a}_{j_1}^\dagger \cdots \hat{a}_{j_m}^\dagger \hat{a}_{k_1} \cdots \hat{a}_{k_m} |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_S \quad (13.17)$$

さらに全粒子数 N の Hilbert 空間における m 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.

$$\hat{f}^{\text{tot}} = \frac{1}{m!} \sum_{\substack{j_1, \dots, j_m \in I \\ k_1, \dots, k_m \in I}} \langle j_1 \cdots j_m | f | k_1 \cdots k_m \rangle \hat{a}_{j_1}^\dagger \cdots \hat{a}_{j_m}^\dagger \hat{a}_{k_1} \cdots \hat{a}_{k_m} \quad (13.18)$$

□