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 11 日

目次

すみません, 自分にとって分かりやすいように一部文節構造を崩してしまいました. 分かりにくいとは思いますが, よろしくお願いします.

1 もし、量子状態の対称化の要請がなかったら？

定義.
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.

定理 1.1 (Q21-1(i)(viii))**.**
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 4 つを仮定する.

1. 2 つの粒子は区別できない.
2. Hilbert 空間 $\mathcal{H}^{(2)}$ において交換演算子 $\hat{E}$ は既約元である.
3. 粒子の順序に依存する観測量が存在する.
4. 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)

このとき粒子状態 $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^{(2)}$ は次のようになる.

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\alpha\rangle|\beta\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|\beta\rangle|\alpha\rangle \tag{1.1}$$

◇

証明
2 つの粒子が区別できないことは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と言える. 粒子交換は既約であるから分解できず, 演算子と状態のどちらかが交換に関して不変量となるが, 観測量の演算子に粒子の順序に依存するものがある為, 状態について粒子交換が成り立つと考えられる.

また $\mathcal{H}^{(2)}$ の粒子状態について $|\alpha\rangle|\beta\rangle$ と $|\beta\rangle|\alpha\rangle$ の重ね合わせにより表現でき, 規格化条件から次のように書ける.

$$|\Psi\rangle = c_1|\alpha\rangle|\beta\rangle + c_2|\beta\rangle|\alpha\rangle \qquad (c_1, c_2 \in \mathbb{C}) \tag{1.2}$$

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \tag{1.3}$$

粒子を交換しても状態が不変であるから次のようになる.

$$|\Psi\rangle = c_1|\alpha\rangle|\beta\rangle + c_2|\beta\rangle|\alpha\rangle = c_2|\alpha\rangle|\beta\rangle + c_1|\beta\rangle|\alpha\rangle \tag{1.4}$$

これより位相を考慮して係数について次のような関係が成り立つ.

$$c_1 = \pm c_2 \tag{1.5}$$

よって粒子状態は次のようになる.

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

また逆は自明である. □

命題 1.2 (Q21-1(ii))**.**

粒子状態の基底を次のように定義する.

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

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.

$$|\Psi\rangle = c_S|\Psi_S\rangle + c_A|\Psi_A\rangle \tag{1.8}$$

◇

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

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= c_1|\alpha\rangle|\beta\rangle + c_2|\beta\rangle|\alpha\rangle && (1.9) \\ &= \frac{c_1+c_2}{2}(|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle) + \frac{c_1-c_2}{2}(|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle) && (1.10) \\ &= \frac{c_1+c_2}{\sqrt{2}}|\Psi_S\rangle + \frac{c_1-c_2}{\sqrt{2}}|\Psi_A\rangle. && (1.11) \end{aligned}$$

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.

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

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.

$$
\begin{aligned}
|\Psi\rangle &= c_S|\Psi_S\rangle + c_A|\Psi_A\rangle && (1.13)\\
&= \frac{c_S}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle) + \frac{c_A}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle) && (1.14)\\
&= \frac{c_S + c_A}{\sqrt{2}}|\alpha\rangle|\beta\rangle + \frac{c_S - c_A}{\sqrt{2}}|\beta\rangle|\alpha\rangle && (1.15)
\end{aligned}
$$

よって同値な表現であることが示された. □

命題 1.3 (Q21-1(iii)(iv)(v))**.**

交換演算子 (exchange operator) $\hat{E}$ を次のように定義する.

$$\hat{E}|\psi\rangle|\psi'\rangle = |\psi'\rangle|\psi\rangle \tag{1.16}$$

このとき次の性質が認められる.

$$\hat{E} = \hat{E}^\dagger = \hat{E}^{-1}, \quad \hat{E}^2 = \hat{1} \tag{1.17}$$

$$\hat{E}|\Psi\rangle = c_S|\Psi_S\rangle - c_A|\Psi_A\rangle \tag{1.18}$$

◇

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.

$$\hat{E}^{-1}|\psi\rangle|\psi'\rangle = \hat{E}^{-1}\hat{E}|\psi'\rangle|\psi\rangle = |\psi'\rangle|\psi\rangle \tag{1.19}$$

$$\langle\psi|\langle\psi'|\hat{E}^\dagger\hat{E}|\psi\rangle|\psi'\rangle = \langle\psi'|\langle\psi|\psi'\rangle|\psi\rangle = \langle\psi|\langle\psi'|\psi\rangle|\psi'\rangle \tag{1.20}$$

これより次のことが分かる.

$$\hat{E} = \hat{E}^\dagger = \hat{E}^{-1} \tag{1.21}$$

また 2 回適用すると恒等演算子となる.

$$\hat{E}^2 = \hat{E}\hat{E}^{-1} = \hat{1} \tag{1.22}$$

次に基底 $|\Psi_S\rangle, |\Psi_A\rangle$ に適用する.

$$\hat{E}|\Psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{E}(|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle) = +\frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle) = +|\Psi_S\rangle \tag{1.23}$$

$$\hat{E}|\Psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{E}(|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle) = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle) = -|\Psi_A\rangle \tag{1.24}$$

よって任意の状態 $|\Psi\rangle$ に適用すると次のようになる.

$$\hat{E}|\Psi\rangle = \hat{E}(c_S|\Psi_S\rangle + c_A|\Psi_A\rangle) = c_S|\Psi_S\rangle - c_A|\Psi_A\rangle \tag{1.25}$$

□

命題 1.4 (Q21-1(vi)(vii)).

2 つの粒子は区別できない, つまり 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ことは $\hat{O}, \hat{E}$ が可換であることと同値である. ◇

証明

観測量 $\hat{O}$ に対して演算子 $\hat{E}\hat{O}\hat{E}$ は粒子交換した後に観測量を適用して戻したものであり, 次のように Hermite であるから観測量を粒子交換した結果に等しい.

$$(\hat{E}\hat{O}\hat{E})^\dagger = \hat{E}^\dagger\hat{O}^\dagger\hat{E}^\dagger = \hat{E}\hat{O}\hat{E}. \tag{1.26}$$

この観測量 $\hat{O}$ が粒子交換した観測量 $\hat{E}\hat{O}\hat{E}$ でも不変であるから $\hat{E}\hat{O}\hat{E} = \hat{O}$ である. これより次のように計算できる.

$$\hat{O}\hat{E} = \hat{E}^{-1}\hat{E}\hat{O}\hat{E} = \hat{E}^{-1}\hat{O} = \hat{E}\hat{O} \tag{1.27}$$

$$[\hat{O}, \hat{E}] = \hat{O}\hat{E} - \hat{E}\hat{O} = 0. \tag{1.28}$$

よって $\hat{O}, \hat{E}$ は可換である. □

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.

$$\langle\hat{O}\rangle = |c_S|^2\langle\Psi_S|\hat{O}|\Psi_S\rangle + |c_A|^2\langle\Psi_A|\hat{O}|\Psi_A\rangle \tag{1.29}$$

◇

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.

$$\begin{aligned}
\langle\hat{O}\rangle &= \langle\Psi|\hat{O}|\Psi\rangle && (1.30)\\
&= (c_S^*\langle\Psi_S| + c_A^*\langle\Psi_A|)\hat{O}(c_S|\Psi_S\rangle + c_A|\Psi_A\rangle) && (1.31)\\
&= |c_S|^2\langle\Psi_S|\hat{O}|\Psi_S\rangle + |c_A|^2\langle\Psi_A|\hat{O}|\Psi_A\rangle + c_S^*c_A\langle\Psi_S|\hat{O}|\Psi_A\rangle + c_A^*c_S\langle\Psi_A|\hat{O}|\Psi_S\rangle && (1.32)\\
&= |c_S|^2\langle\Psi_S|\hat{O}|\Psi_S\rangle + |c_A|^2\langle\Psi_A|\hat{O}|\Psi_A\rangle. && (1.33)
\end{aligned}$$

ただし式 (1.33) において次のような計算をした.

$$\langle\Psi_S|\hat{O}|\Psi_A\rangle = \langle\Psi_S|\hat{E}\hat{O}\hat{E}|\Psi_A\rangle = -\langle\Psi_S|\hat{O}|\Psi_A\rangle = 0 \tag{1.34}$$

$$\langle\Psi_A|\hat{O}|\Psi_S\rangle = \langle\Psi_A|\hat{E}\hat{O}\hat{E}|\Psi_S\rangle = -\langle\Psi_A|\hat{O}|\Psi_S\rangle = 0. \tag{1.35}$$

□

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

$$\langle\Psi_S|\hat{O}|\Psi_S\rangle = \frac{1}{2}(\langle\alpha|\langle\beta| + \langle\beta|\langle\alpha|)\hat{O}(|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle) = +1 \tag{1.36}$$

$$\langle\Psi_A|\hat{O}|\Psi_A\rangle = \frac{1}{2}(\langle\alpha|\langle\beta| - \langle\beta|\langle\alpha|)\hat{O}(|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle) = -1 \tag{1.37}$$

より期待値は c_S, c_A に依存する. (Q21-1(x))

Q21-1(xi) についてはよく分からなかった. 観測量に対応する演算子がすべて粒子交換に関して不変ならば理論の整合性は保っており, 問題ないと思われる. 逆に粒子交換によって変化する観測量が存在することを実験によって確かめられれば, 状態に関して条件を足すべきである為, 予言能力が不足していることになる.

2 n 次対称群 $\mathfrak{S}_n$

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 $\sigma : X \to X$ 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. $X = \{1, 2, \ldots, n\}$ 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.

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

◇

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 2.2 (Q21-3)**.**

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 2.3 (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, Q21-6)**.**

$\sigma_0 \in \mathfrak{S}_n$ とすると $\sigma_0\mathfrak{S}_n = \mathfrak{S}_n\sigma_0 = \mathfrak{S}_n^{-1} = \mathfrak{S}_n$ である. ◇

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. □

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.
任意の置換は一意の巡回置換の積で表現できる. ◇

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.
次に σ' に対しては $i_1, \ldots, i_m$ 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. □

定理 2.6 (Q21-7(i)).
任意の置換は互換の積で表現できる. ◇

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.

$$\begin{aligned}
(i_1\ i_2\ \cdots\ i_m) &= (i_1\ i_3\ \cdots\ i_m)(i_1\ i_2) && (2.5)\\
&= (i_1\ i_4\ \cdots\ i_m)(i_1\ i_3)(i_1\ i_2) && (2.6)\\
&= (i_1\ i_m)(i_1\ i_{m-1})\cdots(i_1\ i_3)(i_1\ i_2). && (2.7)
\end{aligned}$$

これは上のように変形することにより示される. □

定義 (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.

$$\operatorname{sgn}\sigma = (-1)^\sigma = \begin{cases} +1 & (\sigma\text{が偶数個の互換の積で表される}) \\ -1 & (\sigma\text{が奇数個の互換の積で表される}) \end{cases}. \tag{2.8}$$

命題 2.7 (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.

$$\Delta(x_1,\ldots,x_n)=\prod_{1\le i<j\le n}(x_j-x_i). \tag{2.9}$$

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.

$$(x_j-x_i)\mapsto-(x_j-x_i) \tag{2.10}$$
$$(x_a-x_i)(x_a-x_j)\mapsto(x_a-x_i)(x_a-x_j) \tag{2.11}$$
$$(x_i-x_a)(x_a-x_j)\mapsto(x_i-x_a)(x_a-x_j) \tag{2.12}$$
$$(x_i-x_a)(x_j-x_a)\mapsto(x_i-x_a)(x_j-x_a). \tag{2.13}$$

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

$$\Delta(x_{\sigma(1)},\ldots,x_{\sigma(n)})=(-1)^k\Delta(x_1,\ldots,x_n)=(-1)^m\Delta(x_1,\ldots,x_n) \tag{2.14}$$

となる為, 互換の積の個数の偶奇は一致する. □

命題 2.8.
置換の符号の性質として次を満たす.

$$\mathrm{sgn}(\sigma\tau)=\mathrm{sgn}(\sigma)\,\mathrm{sgn}(\tau) \tag{2.15}$$
$$\mathrm{sgn}(\mathrm{id}_X)=+1 \tag{2.16}$$
$$\mathrm{sgn}(\sigma^{-1})=\mathrm{sgn}(\sigma). \tag{2.17}$$

◇

証明
上 2 つは差積に適用することで確かめる.

$$\Delta(x_{\sigma\tau(1)},\ldots,x_{\sigma\tau(n)})=\mathrm{sgn}(\sigma)\Delta(x_{\tau(1)},\ldots,x_{\tau(n)})=\mathrm{sgn}(\sigma)\,\mathrm{sgn}(\tau)\Delta(x_1,\ldots,x_n) \tag{2.18}$$
$$=\mathrm{sgn}(\sigma\tau)\Delta(x_1,\ldots,x_n) \tag{2.19}$$
$$\Delta(x_{\mathrm{id}_X(1)},\ldots,x_{\mathrm{id}_X(n)})=\Delta(x_1,\ldots,x_n)=\mathrm{sgn}(\mathrm{id}_X)\Delta(x_1,\ldots,x_n). \tag{2.20}$$

より $\mathrm{sgn}(\sigma\tau) = \mathrm{sgn}(\sigma)\,\mathrm{sgn}(\tau), \mathrm{sgn}(\mathrm{id}_X) = 1$ となる．また $\mathrm{sgn}(\sigma\tau) = \mathrm{sgn}(\sigma)\,\mathrm{sgn}(\tau)$ より

$$\mathrm{sgn}(\sigma)\,\mathrm{sgn}(\sigma^{-1}) = \mathrm{sgn}(\mathrm{id}_X) = 1. \tag{2.21}$$

であるから $\mathrm{sgn}(\sigma^{-1}) = \mathrm{sgn}(\sigma)$ となる． □

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.
N 個の同一の粒子 $X_1, \ldots, X_N$ からなる全体系の Hilbert 空間 $\mathcal{H}^{(N)} \cong \mathcal{H}_{single} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_{single}$ において置換 $\sigma \in \mathfrak{S}_N$ として演算子 $\hat{P}(\sigma) : \mathcal{H}^{(N)} \to \mathcal{H}^{(N)}$ を状態に対して粒子 X_i を粒子 $X_{\sigma(i)}$ に置き換えて得られる状態とする．

具体的に状態 $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^{(N)}$ に適用すると粒子 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．(Q21-9, Q21-10(i))

$$|\Psi\rangle = \sum_i c^{(i)} \left|\psi_1^{(i)}\right\rangle \left|\psi_2^{(i)}\right\rangle \cdots \left|\psi_N^{(i)}\right\rangle \tag{3.1}$$

$$\hat{P}(\sigma)|\Psi\rangle = \sum_i c^{(i)} \left|\psi_{\sigma^{-1}(1)}^{(i)}\right\rangle \left|\psi_{\sigma^{-1}(2)}^{(i)}\right\rangle \cdots \left|\psi_{\sigma^{-1}(N)}^{(i)}\right\rangle \tag{3.2}$$

$$\langle\xi_1|\langle\xi_2|\cdots\langle\xi_N|\hat{P}(\sigma)|\Psi\rangle = \sum_i c^{(i)} \langle\xi_1|\langle\xi_2|\cdots\langle\xi_N| \left|\psi_{\sigma^{-1}(1)}^{(i)}\right\rangle \left|\psi_{\sigma^{-1}(2)}^{(i)}\right\rangle \cdots \left|\psi_{\sigma^{-1}(N)}^{(i)}\right\rangle \tag{3.3}$$

$$= \left\langle \xi_{\sigma(1)} \right| \left\langle \xi_{\sigma(2)} \right| \cdots \left\langle \xi_{\sigma(N)} \middle| \Psi \right\rangle. \tag{3.4}$$

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．(Q21-10(ii))

$$(\hat{P}(\sigma)\Psi)(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N) = \Psi(\xi_{\sigma(1)}, \xi_{\sigma(2)}, \ldots, \xi_{\sigma(N)}) \tag{3.5}$$

定理 3.1 (Q21-11)**.**
$\hat{P}(\sigma)$ は unitary な準同型である． ◇

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．

$$\hat{P}(\sigma)^\dagger \hat{P}(\sigma)|\Psi\rangle = \left|\psi_{\sigma\sigma^{-1}(1)}\right\rangle \cdots \left|\psi_{\sigma\sigma^{-1}(N)}\right\rangle = |\Psi\rangle \tag{3.6}$$

$$\hat{P}(\sigma)\hat{P}(\sigma)^\dagger|\Psi\rangle = \left|\psi_{\sigma^{-1}\sigma(1)}\right\rangle \cdots \left|\psi_{\sigma^{-1}\sigma(N)}\right\rangle = |\Psi\rangle. \tag{3.7}$$

そして準同型であることは次のようにして成り立つ.

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

$$= \hat{P}(\sigma)\left|\psi_{\tau^{-1}(1)}\right\rangle \cdots \left|\psi_{\tau^{-1}(N)}\right\rangle \tag{3.9}$$

$$= \hat{P}(\sigma)\hat{P}(\tau)|\Psi\rangle. \tag{3.10}$$

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

$$\hat{P}(\mathrm{id}_X) = \hat{1} \tag{3.11}$$

$$\hat{P}(\sigma^{-1}) = \hat{P}(\sigma)^{-1} \tag{3.12}$$

となる. □

定義 (完全対称, 非完全対称)**.**
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, $\hat{P}(\sigma)|\Psi\rangle = \mathrm{sgn}(\sigma)|\Psi\rangle$ となるとき反完全対称であると定義する. そして完全対称, 反完全対称な状態のなす 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 3.2 (Q21-12)**.**
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, 反完全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.

$$\hat{P}(\sigma)|\Psi\rangle = |\Psi\rangle = (+1)^m|\Psi\rangle \qquad \text{(完全対称)} \tag{3.13}$$

$$\hat{P}(\sigma)|\Psi\rangle = \mathrm{sgn}(\sigma)|\Psi\rangle = (-1)^m|\Psi\rangle \qquad \text{(反完全対称)} \tag{3.14}$$

これより同値であることがわかる. □

命題 3.3 (Q21-13)**.**
$\mathcal{H}_S^{(N)}$ と $\mathcal{H}_A^{(N)}$ は直交し, その直和について次のようになる.

$$\begin{cases} \mathcal{H}_S^{(2)} \oplus \mathcal{H}_A^{(2)} = \mathcal{H}^{(2)} \\ \mathcal{H}_S^{(N)} \oplus \mathcal{H}_A^{(N)} \subsetneq \mathcal{H}^{(N)} \quad (N \geq 3) \end{cases} \tag{3.15}$$

◇

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.

$$\begin{aligned}\langle\Psi_S|\Psi_A\rangle &= \langle\Psi_S|\hat{P}(\sigma)^\dagger\hat{P}(\sigma)|\Psi_A\rangle &(3.16)\\ &= -\langle\Psi_S|\Psi_A\rangle = 0 &(3.17)\end{aligned}$$

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.

$$\sum_i c^{(i)}\left(\left|\psi_1^{(i)}\right\rangle\left|\psi_2^{(i)}\right\rangle + \left|\psi_2^{(i)}\right\rangle\left|\psi_1^{(i)}\right\rangle\right) \in \mathcal{H}_S^{(2)} \tag{3.18}$$

$$\sum_i c^{(i)}\left(\left|\psi_1^{(i)}\right\rangle\left|\psi_2^{(i)}\right\rangle - \left|\psi_2^{(i)}\right\rangle\left|\psi_1^{(i)}\right\rangle\right) \in \mathcal{H}_A^{(2)} \tag{3.19}$$

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.

$$|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle|\psi_3\rangle + |\psi_2\rangle|\psi_3\rangle|\psi_1\rangle + |\psi_3\rangle|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle + |\psi_1\rangle|\psi_3\rangle|\psi_2\rangle + |\psi_2\rangle|\psi_1\rangle|\psi_3\rangle + |\psi_3\rangle|\psi_2\rangle|\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_S^{(N)} \tag{3.20}$$

$$|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle|\psi_3\rangle + |\psi_2\rangle|\psi_3\rangle|\psi_1\rangle + |\psi_3\rangle|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle - |\psi_1\rangle|\psi_3\rangle|\psi_2\rangle - |\psi_2\rangle|\psi_1\rangle|\psi_3\rangle - |\psi_3\rangle|\psi_2\rangle|\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_A^{(N)} \tag{3.21}$$

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. □

定理 3.4 (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.

$$\hat{\mathcal{S}}^{(N)} = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\hat{P}(\sigma) \tag{3.22}$$

$$\hat{\mathcal{A}}^{(N)} = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma)\hat{P}(\sigma) \tag{3.23}$$

◇

証明

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

$$\hat{P}(\tau)\hat{\mathcal{S}}^{(N)} = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\hat{P}(\tau\sigma) = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma'\in\mathfrak{S}_N}\hat{P}(\sigma') = \hat{\mathcal{S}}^{(N)} \tag{3.24}$$

$$\hat{P}(\tau)\hat{\mathcal{A}}^{(N)} = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma)\hat{P}(\tau\sigma) = \mathrm{sgn}(\tau)\frac{1}{N!}\sum_{\sigma'\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma')\hat{P}(\sigma') = \mathrm{sgn}(\tau)\hat{\mathcal{A}}^{(N)} \tag{3.25}$$

これより演算子 $\hat{\mathcal{S}}^{(N)}, \hat{\mathcal{A}}^{(N)}$ によって $\mathcal{H}_S^{(N)}, \mathcal{H}_A^{(N)}$ へ移すことが分かる．次に置換演算子の unitary 性より

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

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

これより $\hat{\mathcal{S}}^{(N)}, \hat{\mathcal{A}}^{(N)}$ は Hermite 演算子である．また演算子 $\hat{\mathcal{S}}^{(N)}, \hat{\mathcal{A}}^{(N)}$ を 2 回適用してみる．

$$(\hat{\mathcal{S}}^{(N)})^2 = \frac{1}{N!^2}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\hat{P}(\sigma\tau) = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma'\in\mathfrak{S}_N}\hat{P}(\sigma') = \hat{\mathcal{S}}^{(N)} \tag{3.28}$$

$$(\hat{\mathcal{A}}^{(N)})^2 = \frac{1}{N!^2}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma\tau)\hat{P}(\sigma\tau) = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma'\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma')\hat{P}(\sigma') = \hat{\mathcal{A}}^{(N)} \tag{3.29}$$

これより $\hat{\mathcal{S}}^{(N)}, \hat{\mathcal{A}}^{(N)}$ は射影演算子となる． □

命題 3.5 (Q21-14(iv)(v))**.**

射影演算子の積と和について次のようになる．

$$\hat{\mathcal{S}}^{(N)}\hat{\mathcal{A}}^{(N)} = \hat{\mathcal{A}}^{(N)}\hat{\mathcal{S}}^{(N)} = 0 \tag{3.30}$$

$$\begin{cases} \hat{\mathcal{S}}^{(2)} + \hat{\mathcal{A}}^{(2)} = \hat{1}_{\mathcal{H}^{(2)}} \\ \hat{\mathcal{S}}^{(N)} + \hat{\mathcal{A}}^{(N)} \neq \hat{1}_{\mathcal{H}^{(N)}} \qquad (N \geq 3) \end{cases} \tag{3.31}$$

◇

証明

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

$$\hat{\mathcal{S}}^{(N)}\hat{\mathcal{A}}^{(N)} = \hat{\mathcal{A}}^{(N)}\hat{\mathcal{S}}^{(N)} = \frac{1}{N!^2}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\tau)\hat{P}(\sigma\tau) \tag{3.32}$$

$$= \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma)\left(\frac{1}{N!}\sum_{\sigma'\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma')\hat{P}(\sigma')\right) \tag{3.33}$$

$$= 0 \tag{3.34}$$

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

$$\hat{\mathcal{S}}^{(2)} + \hat{\mathcal{A}}^{(2)} = \frac{1}{2!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_2}\left(\hat{P}(\sigma) + \mathrm{sgn}(\sigma)\hat{P}(\sigma)\right) = 1_{\mathcal{H}^{(2)}} \tag{3.35}$$

$$\hat{\mathcal{S}}^{(N)} + \hat{\mathcal{A}}^{(N)} = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\left(\hat{P}(\sigma) + \mathrm{sgn}(\sigma)\hat{P}(\sigma)\right) \neq \hat{1}_{\mathcal{H}^{(N)}} \qquad (N \geq 3) \tag{3.36}$$

とわかる. □

定理 3.6 (Q21-15)**.**

$1 \leq \mu < \nu \leq N$ 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 3.7.

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.

$$\mathcal{H}_S^{(N)} = \hat{\mathcal{S}}^{(N)}\mathcal{H}^{(N)} \tag{3.37}$$

$$\mathcal{H}_A^{(N)} = \hat{\mathcal{A}}^{(N)}\mathcal{H}^{(N)} \tag{3.38}$$

◇

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.

$$|\Psi_S\rangle = \hat{P}(\sigma)|\Psi_S\rangle = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_n}\hat{P}(\sigma)|\Psi_S\rangle = \hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\Psi_S\rangle \tag{3.39}$$

$$|\Psi_A\rangle = \mathrm{sgn}(\sigma)\hat{P}(\sigma)|\Psi_A\rangle = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_n}\mathrm{sgn}(\sigma)\hat{P}(\sigma)|\Psi_A\rangle = \hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\Psi_A\rangle \tag{3.40}$$

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 3.8 (Q21-16, Q21-17, Q21-18)**.**

$\mathcal{H}_{single}$ 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.

$$\mathcal{H}_S^{(N)} = \mathrm{span}\left\{\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \mid (i_1,\ldots,i_N) \in I_S^{(N)}\right\} \tag{3.41}$$

$$\mathcal{H}_A^{(N)} = \mathrm{span}\left\{\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \mid (i_1,\ldots,i_N) \in I_A^{(N)}\right\} \tag{3.42}$$

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

$$I_S^{(N)} = \{(i_1,\ldots,i_N) \mid i_1,\ldots,i_N \in I \wedge i_1 \leq \cdots \leq i_N\} \tag{3.43}$$

$$I_A^{(N)} = \{(i_1,\ldots,i_N) \mid i_1,\ldots,i_N \in I \wedge i_1 < \cdots < i_N\} \tag{3.44}$$

◇

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.

$$\hat{\mathcal{S}}^{(N)}\mathcal{H}^{(N)} = \hat{\mathcal{S}}^{(N)}\,\mathrm{span}\Big\{|\psi_1\rangle\cdots|\psi_N\rangle \mid |\psi_1\rangle\cdots|\psi_N\rangle \in \mathcal{H}^{(N)}\Big\} \tag{3.45}$$

$$= \mathrm{span}\Big\{\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\psi_1\rangle\cdots|\psi_N\rangle \mid |\psi_1\rangle\cdots|\psi_N\rangle \in \mathcal{H}^{(N)}\Big\} \tag{3.46}$$

$$= \hat{\mathcal{S}}^{(N)}\,\mathrm{span}\{|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \mid i_1,\dots,i_N \in I\} \tag{3.47}$$

$$= \mathrm{span}\Big\{\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \mid i_1,\dots,i_N \in I\Big\} \tag{3.48}$$

$$= \mathrm{span}\Big\{\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \mid (i_1,\dots,i_N) \in I_S^{(N)}\Big\} \tag{3.49}$$

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.

$$\hat{\mathcal{A}}^{(N)}\mathcal{H}^{(N)} = \hat{\mathcal{A}}^{(N)}\,\mathrm{span}\Big\{|\psi_1\rangle\cdots|\psi_N\rangle \mid |\psi_1\rangle\cdots|\psi_N\rangle \in \mathcal{H}^{(N)}\Big\} \tag{3.50}$$

$$= \mathrm{span}\Big\{\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\psi_1\rangle\cdots|\psi_N\rangle \mid |\psi_1\rangle\cdots|\psi_N\rangle \in \mathcal{H}^{(N)}\Big\} \tag{3.51}$$

$$= \hat{\mathcal{A}}^{(N)}\,\mathrm{span}\{|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \mid i_1,\dots,i_N \in I\} \tag{3.52}$$

$$= \mathrm{span}\Big\{\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \mid i_1,\dots,i_N \in I\Big\} \tag{3.53}$$

$$= \mathrm{span}\Big\{\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \mid (i_1,\dots,i_N) \in I_A^{(N)}\Big\} \tag{3.54}$$

これらに対して補題 3.7 を適用して示される. □

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 $\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \quad (i_1,\dots,i_N) \in I_S^{(N)}$ 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 $\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \quad (i_1,\dots,i_N) \in I_A^{(N)}$ 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 3.9 (Q21-19, Q21-20, Q21-21)**.**

粒子状態 $|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S, |\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A$ は粒子数 n_i を用いて次のように表現できる.

$$|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S = \sqrt{\frac{N!}{\prod_{i\in I} n_i!}}\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!\prod_{i\in I} n_i!}}\,\mathrm{per}\Big[|\phi_{i_1}\rangle \quad \cdots \quad |\phi_{i_N}\rangle\Big] \tag{3.55}$$

$$|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A = \sqrt{N!}\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\det\Big[|\phi_{i_1}\rangle \quad \cdots \quad |\phi_{i_N}\rangle\Big] \tag{3.56}$$

◇

証明

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

$$\begin{aligned}\left\|\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\right\| &= \sqrt{\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}|\hat{\mathcal{S}}^{(N)\dagger}\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle} && (3.57)\\ &= \frac{1}{N!}\sqrt{\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}|\hat{P}(\tau)^\dagger\hat{P}(\sigma)|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle} && (3.58)\\ &= \frac{1}{N!}\sqrt{\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\left\langle\phi_{\tau^{-1}(i_1)}\right|\cdots\left\langle\phi_{\tau^{-1}(i_N)}\right|\left|\phi_{\sigma^{-1}(i_1)}\right\rangle\cdots\left|\phi_{\sigma^{-1}(i_N)}\right\rangle} && (3.59)\\ &= \sqrt{\frac{\prod_{i\in I}n_i!}{N!}} && (3.60)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\left\|\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\right\| &= \sqrt{\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}|\hat{\mathcal{A}}^{(N)\dagger}\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle} && (3.61)\\ &= \frac{1}{N!}\sqrt{\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\tau\sigma)\langle\phi_{i_1}|\cdots\langle\phi_{i_N}|\hat{P}(\tau)^\dagger\hat{P}(\sigma)|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle} && (3.62)\\ &= \frac{1}{N!}\sqrt{\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma^2)} && (3.63)\\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} && (3.64)\end{aligned}$$

これより基底状態は次のように書ける.

$$|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S = \sqrt{\frac{N!}{\prod_{i\in I}n_i!}}\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \quad (3.65)$$

$$|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A = \sqrt{N!}\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \quad (3.66)$$

さらに変形を進めると次のようになる.

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{S}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle &= \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\hat{P}(\sigma)|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle && (3.67)\\ &= \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\left|\phi_{\sigma^{-1}(i_1)}\right\rangle\cdots\left|\phi_{\sigma^{-1}(i_N)}\right\rangle && (3.68)\\ &= \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\left|\phi_{i_{\sigma(1)}}\right\rangle\cdots\left|\phi_{i_{\sigma(N)}}\right\rangle && (3.69)\\ &= \frac{1}{N!}\,\mathrm{per}\begin{bmatrix}|\phi_{i_1}\rangle^{(1)} & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle^{(1)}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ |\phi_{i_1}\rangle^{(N)} & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle^{(N)}\end{bmatrix} && (3.70)\\ &= \frac{1}{N!}\,\mathrm{per}\begin{bmatrix}|\phi_{i_1}\rangle & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle\end{bmatrix} && (3.71)\end{aligned}$$

$$\hat{\mathcal{A}}^{(N)}|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma)\hat{P}(\sigma)|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle \tag{3.72}$$

$$= \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma)\left|\phi_{\sigma^{-1}(i_1)}\right\rangle\cdots\left|\phi_{\sigma^{-1}(i_N)}\right\rangle \tag{3.73}$$

$$= \frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}\mathrm{sgn}(\sigma)\left|\phi_{i_{\sigma(1)}}\right\rangle\cdots\left|\phi_{i_{\sigma(N)}}\right\rangle \tag{3.74}$$

$$= \frac{1}{N!}\det\begin{bmatrix}|\phi_{i_1}\rangle^{(1)} & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle^{(1)}\\ \vdots & \ddots & \vdots \\ |\phi_{i_1}\rangle^{(N)} & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle^{(N)}\end{bmatrix} \tag{3.75}$$

$$= \frac{1}{N!}\det\begin{bmatrix}|\phi_{i_1}\rangle & \cdots & |\phi_{i_N}\rangle\end{bmatrix} \tag{3.76}$$

これより示せた. □

命題 3.10.

$$= \sqrt{\frac{\prod_{i\in I} n_i!}{N!}}\sum_{(i_1,\ldots,i_N)\sim(i'_1,\ldots,i'_N)}\left|\phi_{i'_1}\right\rangle\cdots\left|\phi_{i'_N}\right\rangle \tag{3.77}$$

◇

命題 3.11 (Q21-20, Q21-21)**.**

$$\left\langle\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\middle|\phi_{i'_1}\cdots\phi_{i'_N}\right\rangle_S = \delta_{i_1 i'_1}\cdots\delta_{i_N i'_N} \tag{3.78}$$

$$\left\langle\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\middle|\phi_{i'_1}\cdots\phi_{i'_N}\right\rangle_A = \delta_{i_1 i'_1}\cdots\delta_{i_N i'_N} \tag{3.79}$$

$$\sum_{(i_1,\ldots,i_N)\in I_S^{(N)}}\left|\phi_{i'_1}\cdots\phi_{i'_N}\right\rangle_S\langle\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}|_S = \hat{1}_{\mathcal{H}_S^{(N)}} \tag{3.80}$$

$$\sum_{(i_1,\ldots,i_N)\in I_A^{(N)}}\left|\phi_{i'_1}\cdots\phi_{i'_N}\right\rangle_A\langle\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}|_A = \hat{1}_{\mathcal{H}_A^{(N)}} \tag{3.81}$$

$$\mathcal{H}_S^{(N)} = \mathrm{span}\left\{\left|\phi_{i'_1}\cdots\phi_{i'_N}\right\rangle_S \mid (i_1,\ldots,i_N)\in I_S^{(N)}\right\} \tag{3.82}$$

$$\mathcal{H}_A^{(N)} = \mathrm{span}\left\{\left|\phi_{i'_1}\cdots\phi_{i'_N}\right\rangle_A \mid (i_1,\ldots,i_N)\in I_A^{(N)}\right\} \tag{3.83}$$

◇

証明

□

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.

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

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

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

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

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.

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

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

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

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(|\alpha\rangle|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\alpha\rangle|\beta\rangle|\alpha\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle|\alpha\rangle), \tag{5.8}$$

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

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

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.

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

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

◇

6 Bose 粒子系の量子状態の粒子数表示

定理 6.1.

Bose, Fermi 粒子系の粒子数 n_i, m_i について次のような性質を満たす.

$$\begin{aligned} n_i &\in \mathbb{Z}_{\geq 0}, & \sum_{i\in I} n_i &= N \\ m_i &\in \{0,1\}, & \sum_{i\in I} m_i &= N \end{aligned} \tag{6.1}$$

◇

証明

Bose, Fermi 粒子系の粒子状態は次のようにラベル付けされていた.

$$|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S \qquad (i_1,\ldots,i_N \in I, i_1 \leq \cdots \leq i_N) \tag{6.2}$$

$$|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A \qquad (i_1,\ldots,i_N \in I, i_1 < \cdots < i_N) \tag{6.3}$$

これよりこれより粒子数は非負整数であり, 粒子数の総和は N となる. これよりそれぞれの状態は多くとも 1 個であり, n_i を全て合わせて N 個となる. □

定義 (Bose 粒子系の状態の粒子数表示)**.**

Bose 粒子系の粒子状態は粒子数を用いて次のように表現できる.

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

これを粒子数表示または占有数表示という.

定義 (Fermi 粒子系の状態の粒子数表示)**.**
Fermi 粒子系における粒子数表示または占有数表示は次のように書ける.

$$|(n_i)_{i\in I}\rangle = |n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots\rangle = |\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A \tag{6.5}$$

定理 6.2.
N 個の Bose 粒子系について正規直交関係, 完備性, 状態の完全性が成り立つ.

$$\langle (n_i)_{i\in I}|(n'_i)_{i\in I}\rangle = \prod_{i\in I}\delta_{n_i n'_i} \tag{6.6}$$

$$\sum_{\sum_i n_i = N}|(n_i)_{i\in I}\rangle\langle(n_i)_{i\in I}| = \hat{1}_{\mathcal{H}_S^{(N)}} \tag{6.7}$$

$$\mathcal{H}_S^{(N)} = \mathrm{span}\left\{|(n_i)_{i\in I}\rangle \mid n_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}, \sum_{i\in I} n_i = N\right\} \tag{6.8}$$

$\diamond$

証明
それぞれ元の粒子状態に展開することで示せる.

$$\langle (n_i)_{i\in I}|(n'_i)_{i\in I}\rangle = \left\langle \phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\middle|\phi_{i'_1}\cdots\phi_{i'_N}\right\rangle_S = \prod_{i_\mu\in I}\delta_{i_\mu i'_\mu} = \prod_{i\in I}\delta_{n_i n'_i} \tag{6.9}$$

$$\mathrm{span}\left\{|(n_i)_{i\in I}\rangle \mid n_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}, \sum_{i\in I} n_i = N\right\} = \mathrm{span}\{|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S \mid i_\mu \in I\} = \mathcal{H}_S^{(N)} \tag{6.10}$$

$$\sum_{\sum_i n_i = N}|(n_i)_{i\in I}\rangle\langle(n_i)_{i\in I}| = \sum_{i_\mu\in I}|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S\langle\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}|_S = \hat{1}_{\mathcal{H}_S^{(N)}} \tag{6.11}$$

$\square$

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.

$$\mathcal{H}_{Bose} = \bigoplus_{N=0}^{\infty}\mathcal{H}_S^{(N)} \tag{6.12}$$

定義から

$$N \neq N' \iff \mathcal{H}_S^{(N)} \perp \mathcal{H}_S^{(N')} \tag{6.13}$$

定理 6.3.

一般の Bose 粒子系について正規直交関係, 完備性, 状態の完全性が成り立つ.

$$\langle (n_i)_{i\in I} | (n'_i)_{i\in I} \rangle = \prod_{i\in I} \delta_{n_i n'_i} \tag{6.14}$$

$$\sum_{n_i} |(n_i)_{i\in I}\rangle\langle (n_i)_{i\in I}| = \hat{1}_{\mathcal{H}_{Bose}} \tag{6.15}$$

$$\mathcal{H}_{Bose} = \mathrm{span}\{|(n_i)_{i\in I}\rangle \mid n_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}\} \tag{6.16}$$

◇

証明

定理 6.2 について N が異なる状態も考えれば成り立つことが分かる. □

7 Fermi 粒子系の量子状態の粒子数表示

定理 7.1.

N 個の Fermi 粒子系について正規直交関係, 完備性, 状態の完全性が成り立つ.

$$\langle (n_i)_{i\in I} | (n'_i)_{i\in I} \rangle = \prod_{i\in I} \delta_{n_i n'_i} \tag{7.1}$$

$$\sum_{n_i \in \{0,1\}, \sum_{i\in I} n_i = N} |(n_i)_{i\in I}\rangle\langle (n'_i)_{i\in I}| = \hat{1}_{\mathcal{H}_A^{(N)}} \tag{7.2}$$

$$\mathcal{H}_A^{(N)} = \mathrm{span}\left\{ |(n_i)_{i\in I}\rangle \mid n_i \in \{0,1\}, \sum_{i\in I} n_i = N \right\} \tag{7.3}$$

◇

証明

それぞれ元の粒子状態に展開することで示せる.

$$\langle (n_i)_{i\in I} | (n'_i)_{i\in I} \rangle = \left\langle \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N} \middle| \phi_{i'_1} \cdots \phi_{i'_N} \right\rangle_A = \prod_{i\in I} \delta_{n_i n'_i} \tag{7.4}$$

$$\sum_{n_i \in \{0,1\}, \sum_{i\in I} n_i = N} |(n_i)_{i\in I}\rangle\langle (n_i)_{i\in I}| = \sum_{i_\mu} |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle\langle \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}| = \hat{1}_{\mathcal{H}_A^{(N)}} \tag{7.5}$$

$$\mathcal{H}_A^{(N)} = \mathrm{span}\left\{ |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_A \mid (i_1, \ldots, i_N) \in I_A^{(N)} \right\} \tag{7.6}$$

$$= \mathrm{span}\left\{ |(n_i)_{i\in I}\rangle \mid n_i \in \{0,1\}, \sum_{i\in I} n_i = N \right\} \tag{7.7}$$

□

定義.

$$\mathcal{H}_{Fermi} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_A^{(N)} \tag{7.8}$$

$$N \neq N' \iff \mathcal{H}_A^{(N)} \perp \mathcal{H}_A^{(N')} \tag{7.9}$$

定理 7.2.

一般の Fermi 粒子系について正規直交関係, 完備性, 状態の完全性が成り立つ.

$$\langle (n_i)_{i\in I} | (n'_i)_{i\in I} \rangle = \prod_{i\in I} \delta_{n_i n'_i} \tag{7.10}$$

$$\sum_{n_i \in \{0,1\}, \sum_{i\in I} n_i = N} |(n_i)_{i\in I}\rangle\langle (n'_i)_{i\in I}| = \hat{1}_{\mathcal{H}_{Fermi}} \tag{7.11}$$

$$\mathcal{H}_{Fermi} = \mathrm{span}\left\{ |(n_i)_{i\in I}\rangle \mid n_i \in \{0,1\}, \sum_{i\in I} n_i = N \right\} \tag{7.12}$$

◇

証明

定理 7.1 について N が異なる状態も考えれば成り立つことが分かる. □

8 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.

$$\hat{a}_i \frac{1}{\sqrt{N!}} \mathrm{per}\left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \right] = \frac{1}{\sqrt{(N-1)!}} \sum_{i_\mu = i} \mathrm{per}\left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_{\mu-1}}\rangle \quad |\phi_{i_{\mu+1}}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \right] \tag{8.1}$$

$$\hat{a}_i^\dagger \frac{1}{\sqrt{N!}} \mathrm{per}\left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \right] = \frac{1}{\sqrt{(N+1)!}} \mathrm{per}\left[|\phi_i\rangle \quad |\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle \right] \tag{8.2}$$

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

$$\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a} \tag{8.3}$$

$$\hat{N} = \sum_{i\in I} \hat{n}_i \tag{8.4}$$

定理 8.1 (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.

$$\hat{a}_i|\ldots,n_i,\ldots\rangle = \sqrt{n_i}|\ldots,n_i-1,\ldots\rangle \tag{8.5}$$

$$\hat{a}_i^\dagger|\ldots,n_i,\ldots\rangle = \sqrt{n_i+1}|\ldots,n_i+1,\ldots\rangle \tag{8.6}$$

◇

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.

$$\hat{a}_i\frac{1}{\sqrt{N!\prod_{j\in I}n_j!}}\,\mathrm{per}\left[|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\right] = \frac{n_i}{\sqrt{(N-1)!\prod_{j\in I}n_j!}}\,\mathrm{per}\left[|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_{\mu-1}}\rangle\quad|\phi_{i_{\mu+1}}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{8.7}$$

$$\hat{a}_i^\dagger\frac{1}{\sqrt{N!\prod_{j\in I}n_j!}}\,\mathrm{per}\left[|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{(N+1)!\prod_{j\in I}n_j!}}\,\mathrm{per}\left[|\phi_{i}\rangle\quad|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{8.8}$$

Bose 粒子系の粒子数表示は次のように展開できる.

$$|\ldots,n_i,\ldots\rangle = |\phi_{i_1},\ldots,\phi_{i_N}\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{N!\prod_{j\in I}n_j!}}\,\mathrm{per}\left[|\phi_{i_1}\rangle\cdots|\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{8.9}$$

これより定義と次の式は同値である.

$$\hat{a}_i|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S = \sqrt{n_i}|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_{\mu-1}}\phi_{i_{\mu+1}}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S \tag{8.10}$$

$$\hat{a}_i^\dagger|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S = \sqrt{n_i+1}|\phi_i\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_S \tag{8.11}$$

よって次の式は同値である.

$$\hat{a}_i|\ldots,n_i,\ldots\rangle = \sqrt{n_i}|\ldots,n_i-1,\ldots\rangle \tag{8.12}$$

$$\hat{a}_i^\dagger|\ldots,n_i,\ldots\rangle = \sqrt{n_i+1}|\ldots,n_i+1,\ldots\rangle \tag{8.13}$$

□

命題 8.2 (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.

$$[\hat{a}_i,\hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \qquad [\hat{a}_i,\hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger,\hat{a}_j^\dagger] = 0 \tag{8.14}$$

◇

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

$$\hat{a}_i\hat{a}_i^\dagger|\ldots,n_i,\ldots\rangle=\sqrt{n_i+1}\hat{a}_i|\ldots,n_i+1,\ldots\rangle=(n_i+1)|\ldots,n_i,\ldots\rangle \tag{8.15}$$

$$\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i|\ldots,n_i,\ldots\rangle=\sqrt{n_i}\hat{a}_i^\dagger|\ldots,n_i-1,\ldots\rangle=n_i|\ldots,n_i,\ldots\rangle \tag{8.16}$$

よりそれぞれの交換関係は次のようになる.

$$[\hat{a}_i,\hat{a}_i^\dagger]=\hat{a}_i\hat{a}_i^\dagger-\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i=(n_i+1)-n_i=1 \tag{8.17}$$

$$[\hat{a}_i,\hat{a}_i]=[\hat{a}_i^\dagger,\hat{a}_i^\dagger]=0 \tag{8.18}$$

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

$$\hat{a}_i\hat{a}_j|\ldots,n_i,\ldots,n_j,\ldots\rangle=\sqrt{n_in_j}|\ldots,n_i-1,\ldots,n_j-1,\ldots\rangle \tag{8.19}$$

$$\hat{a}_i\hat{a}_j^\dagger|\ldots,n_i,\ldots,n_j,\ldots\rangle=\sqrt{n_i(n_j+1)}|\ldots,n_i-1,\ldots,n_j+1,\ldots\rangle \tag{8.20}$$

$$\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_j|\ldots,n_i,\ldots,n_j,\ldots\rangle=\sqrt{(n_i+1)n_j}|\ldots,n_i+1,\ldots,n_j-1,\ldots\rangle \tag{8.21}$$

$$\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_j^\dagger|\ldots,n_i,\ldots,n_j,\ldots\rangle=\sqrt{(n_i+1)(n_j+1)}|\ldots,n_i+1,\ldots,n_j+1,\ldots\rangle \tag{8.22}$$

よりそれぞれの交換関係は次のようになる.

$$[\hat{a}_i,\hat{a}_j^\dagger]=\hat{a}_i\hat{a}_j^\dagger-\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i=0 \tag{8.23}$$

$$[\hat{a}_i,\hat{a}_j]=\hat{a}_i\hat{a}_j-\hat{a}_j\hat{a}_i=0 \tag{8.24}$$

$$[\hat{a}_i^\dagger,\hat{a}_j^\dagger]=\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_j^\dagger-\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i^\dagger=0 \tag{8.25}$$

よって示された. □

命題 8.3 (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.

$$\langle\ldots,n_i-1,\ldots|\hat{a}_i|\ldots,n_i,\ldots\rangle=\langle\ldots,n_i,\ldots|\hat{a}_i^\dagger|\ldots,n_i-1,\ldots\rangle=\sqrt{n_i} \tag{8.26}$$

$$\langle(n_i)_{i\in I}|\hat{a}_i|(n_i')_{i\in I}\rangle=\langle(n_i')_{i\in I}|\hat{a}_i^\dagger|(n_i)_{i\in I}\rangle=0 \qquad (otherwise) \tag{8.27}$$

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

命題 8.4 (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.

$$\hat{n}_i^\dagger = (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i)^\dagger = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \hat{n}_i \tag{8.28}$$

$$\hat{n}_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle = n_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle \tag{8.29}$$

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.

$$\hat{N}^\dagger = \sum_{i\in I} \hat{n}_i^\dagger = \sum_{i\in I} \hat{n}_i = \hat{N} \tag{8.30}$$

$$\hat{N}|(n_i)_{i\in I}\rangle = \sum_{i\in I} \hat{n}_i|(n_i)_{i\in I}\rangle = \sum_{i\in I} n_i|(n_i)_{i\in I}\rangle = N|(n_i)_{i\in I}\rangle \tag{8.31}$$

□

定理 8.5 (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.

$$(\hat{a}_i)^\dagger = \hat{a}_i^\dagger, \qquad [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \qquad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0, \qquad \hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = n_i \tag{8.32}$$

◇

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.

$$\hat{n}_i\hat{a}_i = (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i)\hat{a}_i = (\hat{a}_i\hat{a}_i^\dagger - 1)\hat{a}_i = (n_i - 1)\hat{a}_i \tag{8.33}$$

$$\hat{n}_i\hat{a}_i^\dagger = \hat{a}_i^\dagger(\hat{a}_i\hat{a}_i^\dagger) = \hat{a}_i^\dagger(\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i + 1) = (n_i + 1)\hat{a}_i^\dagger \tag{8.34}$$

$$\hat{n}_j\hat{a}_i = \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j\hat{a}_i = \hat{a}_i\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j = n_j\hat{a}_i \qquad (i \neq j) \tag{8.35}$$

$$\hat{n}_j\hat{a}_i^\dagger = \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j\hat{a}_i^\dagger = \hat{a}_i^\dagger\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j = n_j\hat{a}_i^\dagger \qquad (i \neq j) \tag{8.36}$$

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

$$\langle\ldots, n_i - 1, \ldots|\hat{a}_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle = \langle\ldots, n_i, \ldots|\hat{a}_i^\dagger|\ldots, n_i - 1, \ldots\rangle \tag{8.37}$$

$$n_i = \langle\ldots, n_i, \ldots|\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle \tag{8.38}$$

であるから次のようになる.

$$\hat{a}_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle = \sqrt{n_i}|\ldots, n_i - 1, \ldots\rangle \tag{8.39}$$

$$\hat{a}_i^\dagger|\ldots, n_i, \ldots\rangle = \sqrt{n_i + 1}|\ldots, n_i + 1, \ldots\rangle \tag{8.40}$$

これらの式から定理 8.1 より定義を導ける. □

命題 8.6.

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

$$|\mathrm{vac}\rangle = |0, 0, 0, \ldots\rangle \tag{8.41}$$

このとき次のような性質が認められる.

$$\hat{a}_i|\mathrm{vac}\rangle = 0 \tag{8.42}$$

$$\langle\mathrm{vac}|\mathrm{vac}\rangle = 1 \tag{8.43}$$

$$|(n_i)_{i\in I}\rangle = \prod_{i\in I}\frac{(\hat{a}_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}}|\mathrm{vac}\rangle \tag{8.44}$$

$\diamond$

証明

それぞれ定義を展開することで導かれる.

$$\hat{a}_i|\mathrm{vac}\rangle = \hat{a}_i|0, 0, \ldots\rangle = 0 \tag{8.45}$$

$$\langle\mathrm{vac}|\mathrm{vac}\rangle = \langle 0, 0, \ldots|0, 0, \ldots\rangle = \prod_{i\in I}\delta_{0,0} = 1 \tag{8.46}$$

$$|(n_i)_{i\in I}\rangle = \prod_{i\in I}\frac{(\hat{a}_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}}|0, 0, \ldots\rangle = \prod_{i\in I}\frac{(\hat{a}_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}}|\mathrm{vac}\rangle \tag{8.47}$$

$\square$

9 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.

$$\hat{c}_i \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\right] = \begin{cases} \dfrac{(-1)^\mu}{\sqrt{(N-1)!}} \det\left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_{\mu-1}}\rangle |\phi_{i_{\mu+1}}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\right] & (n_i = 1) \\ 0 & (n_i = 0) \end{cases} \tag{9.1}$$

$$\hat{c}_i^\dagger \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{(N+1)!}} \det\left[|\phi_i\rangle \quad |\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{9.2}$$

$$\hat{n}_i = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \tag{9.3}$$

$$\hat{N} = \sum_{i \in I} \hat{n}_i \tag{9.4}$$

命題 9.1.

差分 ◇

定理 9.2 (Q21-50, Q21-51)**.**

$$\hat{c}_i |\ldots, n_i, \ldots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} n_i |\ldots, 0, \ldots\rangle \tag{9.5}$$

$$\hat{c}_i^\dagger |\ldots, n_i, \ldots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} (1 - n_i) |\ldots, 1, \ldots\rangle \tag{9.6}$$

◇

証明

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.

$$\hat{c}_i \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\right] = \frac{(-1)^\mu}{\sqrt{(N-1)!}} n_i \det\left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_{\mu-1}}\rangle |\phi_{i_{\mu+1}}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{9.7}$$

$$\hat{c}_i^\dagger \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\left[|\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{(N+1)!}} \det\left[|\phi_i\rangle \quad |\phi_{i_1}\rangle \cdots |\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{9.8}$$

Fermi 粒子系の粒子数表示は次のように展開できる.

$$|n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots\rangle = |\phi_{i_1} \cdots \phi_{i_N}\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\left[|\phi_{i_1}\rangle \quad \cdots \quad |\phi_{i_N}\rangle\right] \tag{9.9}$$

これより定義と次の式は同値である.

$$\hat{c}_i|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle = (-1)^{\mu} n_i \big|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_{\mu-1}}\phi_{i_{\mu+1}}\cdots\phi_{i_N}\big\rangle_A \tag{9.10}$$

$$\hat{c}_i^{\dagger}|\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle = |\phi_i\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_N}\rangle_A \tag{9.11}$$

よって次の式は同値である.

$$\hat{c}_i|\ldots,n_i,\ldots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} n_i|\ldots,1-n_i,\ldots\rangle \tag{9.12}$$

$$\hat{c}_i^{\dagger}|\ldots,n_i,\ldots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j}(1-n_i)|\ldots,1-n_i,\ldots\rangle \tag{9.13}$$

□

定理 9.3 (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.

$$\{\hat{c}_i,\hat{c}_j^{\dagger}\} = \delta_{ij}, \qquad \{\hat{c}_i,\hat{c}_j\} = \{\hat{c}_i^{\dagger},\hat{c}_j^{\dagger}\} = 0 \tag{9.14}$$

◇

証明

$$\hat{c}_i|\ldots,n_i,\ldots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} n_i|\ldots,0,\ldots\rangle \tag{9.15}$$

$$\hat{c}_i^{\dagger}|\ldots,n_i,\ldots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j}(1-n_i)|\ldots,1,\ldots\rangle \tag{9.16}$$

$$\hat{c}_i\hat{c}_i^{\dagger}|\ldots,n_i,\ldots\rangle = (1-n_i)|\ldots,0,\ldots\rangle \tag{9.17}$$

$$\hat{c}_i^{\dagger}\hat{c}_i|\ldots,n_i,\ldots\rangle = n_i|\ldots,1,\ldots\rangle \tag{9.18}$$

$$\hat{c}_i\hat{c}_i|\ldots,n_i,\ldots\rangle = 0 \tag{9.19}$$

$$\hat{c}_i^{\dagger}\hat{c}_i^{\dagger}|\ldots,n_i,\ldots\rangle = 0 \tag{9.20}$$

$$\{\hat{c}_i,\hat{c}_i^{\dagger}\} = 1, \qquad \{\hat{c}_i,\hat{c}_i\} = \{\hat{c}_i^{\dagger},\hat{c}_i^{\dagger}\} = 0 \tag{9.21}$$

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.

$$\hat{c}_i\hat{c}_j^\dagger|\ldots,n_i,\ldots,n_j,\ldots\rangle = (-1)^{\sum_{k=i}^{j-1}n_k}n_i(1-n_j)|\ldots,1-n_i,\ldots,1-n_j,\ldots\rangle \tag{9.22}$$
$$\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_i|\ldots,n_i,\ldots,n_j,\ldots\rangle = (-1)^{1+\sum_{k=i}^{j-1}n_k}n_i(1-n_j)|\ldots,1-n_i,\ldots,1-n_j,\ldots\rangle \tag{9.23}$$
$$\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j|\ldots,n_i,\ldots,n_j,\ldots\rangle = (-1)^{\sum_{k=i}^{j-1}n_k}(1-n_i)n_j|\ldots,1-n_i,\ldots,1-n_j,\ldots\rangle \tag{9.24}$$
$$\hat{c}_j\hat{c}_i^\dagger|\ldots,n_i,\ldots,n_j,\ldots\rangle = (-1)^{1+\sum_{k=i}^{j-1}n_k}(1-n_i)n_j|\ldots,1-n_i,\ldots,1-n_j,\ldots\rangle \tag{9.25}$$
$$\hat{c}_i\hat{c}_j|\ldots,n_i,\ldots,n_j,\ldots\rangle = (-1)^{\sum_{k=i}^{j-1}n_k}n_in_j|\ldots,1-n_i,\ldots,1-n_j,\ldots\rangle \tag{9.26}$$
$$\hat{c}_j\hat{c}_i|\ldots,n_i,\ldots,n_j,\ldots\rangle = (-1)^{1+\sum_{k=i}^{j-1}n_k}n_in_j|\ldots,1-n_i,\ldots,1-n_j,\ldots\rangle \tag{9.27}$$
$$\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j^\dagger|\ldots,n_i,\ldots,n_j,\ldots\rangle = (-1)^{\sum_{k=i}^{j-1}n_k}(1-n_i)(1-n_j)|\ldots,1-n_i,\ldots,1-n_j,\ldots\rangle \tag{9.28}$$
$$\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_i^\dagger|\ldots,n_i,\ldots,n_j,\ldots\rangle = (-1)^{1+\sum_{k=i}^{j-1}n_k}(1-n_i)(1-n_j)|\ldots,1-n_i,\ldots,1-n_j,\ldots\rangle \tag{9.29}$$

$\{A,B\}=\{B,A\}$ 次の反交換関係が求まる.

$$\{\hat{c}_i,\hat{c}_j^\dagger\}=\{\hat{c}_i,\hat{c}_j\}=\{\hat{c}_i^\dagger,\hat{c}_j^\dagger\}=0 \qquad (i\neq j) \tag{9.30}$$

□

命題 9.4.

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

$$\langle n_1',\ldots,n_i',\ldots|\hat{c}_i^\dagger|n_1,\ldots,n_i,\ldots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1}n_j}\langle n_1',\ldots,n_i',\ldots|n_1,\ldots,n_i+1,\ldots\rangle \tag{9.31}$$
$$= (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1}n_j}\delta_{n_1n_1'}\cdots\delta_{n_{i-1}n_{i-1}'}\delta_{n_i+1n_i'}\delta_{n_{i+1}n_{i+1}'}\cdots \tag{9.32}$$
$$\langle n_1,\ldots,n_i,\ldots|\hat{c}_i|n_1',\ldots,n_i',\ldots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1}n_j'}\langle n_1,\ldots,n_i,\ldots|n_1',\ldots,n_i'-1,\ldots\rangle \tag{9.33}$$
$$= (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1}n_j'}\delta_{n_1n_1'}\cdots\delta_{n_{i-1}n_{i-1}'}\delta_{n_i+1n_i'}\delta_{n_{i+1}n_{i+1}'}\cdots \tag{9.34}$$

より Hermite 共役である. □

命題 9.5.

$$\hat{n}_i^\dagger=\hat{n}_i, \hat{n}_i|\ldots,n_i,\ldots\rangle = n_i|\ldots,n_i,\ldots\rangle \tag{9.35}$$
$$\hat{N}^\dagger=\hat{N}, \hat{N}|(n_i)_{i\in I}\rangle = N|(n_i)_{i\in I}\rangle \tag{9.36}$$

◇

証明

$$\hat{n}_i^\dagger = (\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i)^\dagger = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i = \hat{n}_i \tag{9.37}$$

$$\hat{N}^\dagger = \sum_{i\in I} \hat{n}_i^\dagger = \sum_{i\in I} \hat{n}_i = \hat{N} \tag{9.38}$$

$$\hat{n}_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle = (-1)^{2\sum_{j=1}^{i-1} n_j} n_i^2|\ldots, n_i, \ldots\rangle = n_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle \tag{9.39}$$

$$\hat{N}|(n_i)_{i\in I}\rangle = \sum_{i\in I} \hat{n}_i|(n_i)_{i\in I}\rangle = \sum_{i\in I} n_i|(n_i)_{i\in I}\rangle = N|(n_i)_{i\in I}\rangle \tag{9.40}$$

□

命題 9.6.

$$|\mathrm{vac}\rangle = |0, 0, \ldots\rangle \tag{9.41}$$

$$\hat{c}_i|\mathrm{vac}\rangle = 0 \tag{9.42}$$

$$\langle\mathrm{vac}|\mathrm{vac}\rangle = 1 \tag{9.43}$$

◇

証明

□

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

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e}\sum_{\mu=1}^{N} \hat{\boldsymbol{p}}_\mu^2 - Ze^2\sum_{\mu=1}^{N}\frac{1}{|\hat{\boldsymbol{r}}_\mu|} + e^2\sum_{1\leq\mu<\nu\leq N}\frac{1}{|\hat{\boldsymbol{r}}_\mu - \hat{\boldsymbol{r}}_\nu|} + \frac{e}{2m_ec}(\hat{\boldsymbol{L}} + 2\hat{\boldsymbol{S}})\cdot\boldsymbol{B} + \frac{e^2}{8m_ec^2}\sum_{\mu=1}^{N}(\boldsymbol{B}\times\hat{\boldsymbol{r}}_\mu)^2 \tag{10.1}$$