[多粒子系の量子力学]

これまではずっと 1粒子系 → N粒子系への拡張

▷ 量子論の基本原理はそのまま

- 重ね合わせ
- 波動関数と物理的状態の対応
- 時間発展の法則 (1) $i\hbar \frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle$

  $\hat{H}$ ハミルトニアン (エネルギーに対応する演算子)
- エネルギー固有状態 (定常状態) (2) $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$
- 測定の規則 (ボルン規則)

▷ 同種粒子系では新しい原理!

〈異った粒子の系〉

→ 互いに区別できる。

§2粒子系の状態

種類の異なる2つの粒子 → たとえば陽子と電子

粒子1，粒子2

r_1 r_2

粒子1の位置 r_1　粒子2の位置 r_2

(1) 粒子1の状態 $\varphi(r_1)$　粒子2の状態 $\psi(r_2)$ → 2粒子の状態 $\varphi(r_1)\psi(r_2)$

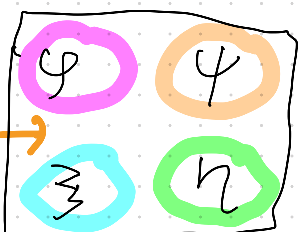
2つの関数の積

(2) 粒子1の状態 $\xi(r_1)$　粒子2の状態 $\eta(r_2)$ → 2粒子の状態 $\xi(r_1)\eta(r_2)$

重ね合わせの原理から　$\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ について

(3) $\alpha\varphi(r_1)\psi(r_2)+\beta\xi(r_1)\eta(r_2)$ という状態も可能

この状態は一般には（r_1の関数）×（r_2の関数）とは書けない！

空間 → 

として

(4) $(a\varphi(r_1)+b\xi(r_1))(a'\psi(r_2)+b'\eta(r_2))$

$= aa'\varphi(r_1)\psi(r_2)+bb'\xi(r_1)\eta(r_2)$

$+ ab'\varphi(r_1)\eta(r_2)+a'b\,\xi(r_1)\psi(r_2)$　よぶん

2粒子系の一般の状態

$\varphi(r_1)\psi(r_2)$ という形の任意の状態の線形結合

$\Downarrow$

r_1 と r_2 の任意の関数 $\Phi(r_1, r_2)$ ← 6変数関数！

（参「波動関数は実空間における『場』を表わすのか？」→ 答はNO

1粒子 $\varphi(r)$ 「空間の各点 r に $\varphi(r)$ という量がある」と思いたくもなる

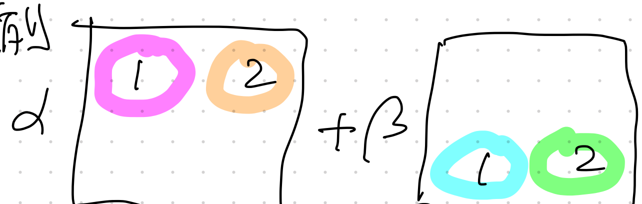
2粒子 $\Phi(r_1, r_2)$ 3次元空間の「場」と思うことは決してできない.）

エンタングルメント entanglement（量子もつれ，量子的からみ合い）

2粒子系の状態 $\Phi(r_1, r_2)$ が (1) $\Phi(r_1, r_2) = \varphi(r_1)\psi(r_2)$ の形に書けないとき

状態 $\Phi(r_1, r_2)$ では 粒子1と粒子2がエンタングルしている という

例



粒子1の位置を測定

- 左上 → 粒子2は右上！
- 左下 → 粒子2は右下！

テレパシーとか瞬間移動とかとは関係ないです

§2粒子系の状態の扱い

内積とノルム

状態 $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ と $\Xi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ の内積

(1) $$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int d^3 r_1\, d^3 r_2\, (\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2))^* \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

状態 $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ のノルム

(2) $$\| \Psi \| = \sqrt{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \sqrt{\int d^3 r_1\, d^3 r_2\, |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2}$$

(3) $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \varphi(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_2)$, $\Xi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \xi(\mathbf{r}_1)\eta(\mathbf{r}_2)$ なら

(4) $$\langle \Psi | \Xi \rangle = \int d^3 r_1\, d^3 r_2\, (\varphi(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_2))^* \xi(\mathbf{r}_1)\eta(\mathbf{r}_2)$$
$$= \int d^3 r_1\, \varphi^*(\mathbf{r}_1)\xi(\mathbf{r}_1) \int d^3 r_2\, \psi^*(\mathbf{r}_2)\eta(\mathbf{r}_2)$$
$$= \langle \varphi | \xi \rangle \langle \psi | \eta \rangle$$

1粒子状態についての内積

◎存在確率密度

1粒子状態 $\psi(\boldsymbol{r})$

規格化条件 (1) $\|\psi\| = 1$

(2) $P(\boldsymbol{r}) = |\psi(\boldsymbol{r})|^2$ 粒子の位置を測定したとき $\boldsymbol{r}$ でみつかる確率密度

2粒子状態 $\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ ← 2つの粒子は異った種類

規格化条件 (3) $\|\Psi\| = 1$

(4) $P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = |\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)|^2$ 2つの粒子の位置を同時に測定したとき

それぞれ $\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ でみつかる確率密度

規格化条件 (5) $\int d^3r_1\, d^3r_2\, P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = 1$

(6) $P_1(\boldsymbol{r}_1) = \int d^3r_2\, P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \int d^3r_2\, |\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)|^2$

粒子1のみの位置を測定したとき $\boldsymbol{r}_1$ でみつかる確率密度

正規直交完全系

(1) $\begin{cases} \text{粒子1の正規直交完全系 } \{\varphi_j(x_1)\}_{j=1,2,\cdots} \\ \text{粒子2の正規直交完全系 } \{\psi_\ell(x_2)\}_{\ell=1,2,\cdots} \end{cases}$

(2) 2粒系の正規直交完全系 $\{\varphi_j(x_1)\psi_\ell(x_2)\}_{j,\ell=1,2,\cdots}$

任意の状態は (3) $\Phi(x_1,x_2)=\sum_{j,\ell=1}^{\infty}\alpha_{j,\ell}\,\varphi_j(x_1)\psi_\ell(x_2)$ と展開できる

Dirac記号

$\mathcal{H}_1$ 粒子1の状態空間　$\mathcal{H}_2$ 粒子2の状態空間

$\otimes$ テンソル積という

$\mathcal{H}=\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2$ 2粒子の状態空間

(4) $|\varphi\rangle\in\mathcal{H}_1$, $|\psi\rangle\in\mathcal{H}_2$ のとき $\boxed{|\varphi\rangle|\psi\rangle}\in\mathcal{H}$

$\varphi(x_1)\psi(x_2)$ に対応するケット状態

($|\varphi\rangle\otimes|\psi\rangle$, $|\varphi\rangle_1|\psi\rangle_2$, $|\varphi\rangle_1\otimes|\psi\rangle_2$ などとも書く)

- 共役 (5) $(|\varphi\rangle_1|\psi\rangle_2)^\dagger={}_2\langle\psi|\,{}_1\langle\varphi|$ ← これには色々な書き方がある.
- $|\varphi\rangle|\psi\rangle$ と $|\xi\rangle|\eta\rangle$ の内積 (6) $({}_2\langle\psi|\,{}_1\langle\varphi|)\,|\xi\rangle_1|\eta\rangle_2=\langle\varphi|\xi\rangle\langle\psi|\eta\rangle$

(P4-(4) と同じ)

演算子

ブツウに作用されればよい.

(1) かけ算演算子 $V(r_1, r_2) \rightarrow V(r_1, r_2)\Psi(r_1, r_2)$

(2) 微分演算子 $\Delta_1 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \rightarrow \Delta_1 \Psi(r_1, r_2)$

$r_1 = (x_1, y_1, z_1)$

一般的な定ぎ

$\hat{A}$ 粒子1の演算子　$\hat{B}$ 粒子2の演算子　$\hat{A}\otimes\hat{B}$ 全系の演算子

$|\varphi\rangle \in \mathcal{H}_1,\ |\psi\rangle \in \mathcal{H}_2$

$\hat{A}\otimes\hat{1}$ を単に $\hat{A}$ と書くことも多い

(3) $(\hat{A}\otimes\hat{B})|\varphi\rangle|\psi\rangle = (\hat{A}|\varphi\rangle)(\hat{B}|\psi\rangle)$ と定ぎ

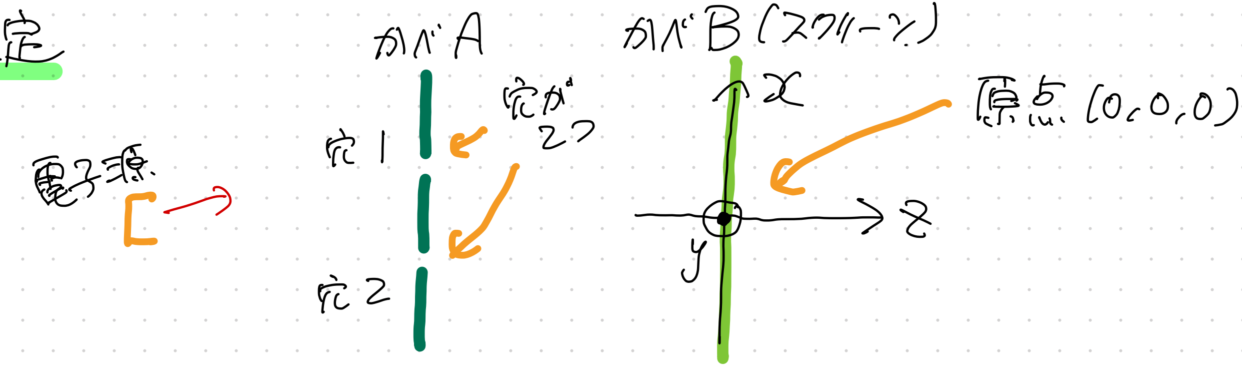
線形性を要請して一般の状態に拡張

(4) $(\hat{A}\otimes\hat{B})(\alpha|\Psi\rangle + \beta|\Phi\rangle) = \alpha(\hat{A}\otimes\hat{B})|\Psi\rangle + \beta(\hat{A}\otimes\hat{B})|\Phi\rangle$

(例 (5) $(\hat{A}\otimes\hat{B})(\alpha|\varphi\rangle|\psi\rangle + \beta|\xi\rangle|\eta\rangle) = \alpha\hat{A}|\varphi\rangle\hat{B}|\psi\rangle + \beta\hat{A}|\xi\rangle\hat{B}|\eta\rangle$)

§1 電子の干渉実験 (量子力学1の最初!)

基本の設定



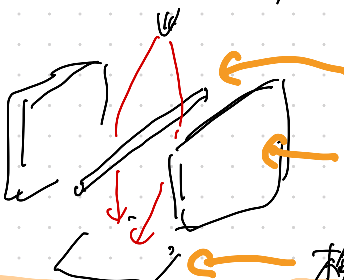
思考実験

- 電子を1回に1つ打ち出す (弱い電子源)
- かべBに電子があたったらその位置 (x,y) を記録

何度もくり返す → あたった位置のデータ → (x,y) に電子があたる確率密度 $P(x,y)$

実際の実験 Tonomura, Endo, Matsuda, Kawasaki, Ezawa 1989 (江沢本 p71)

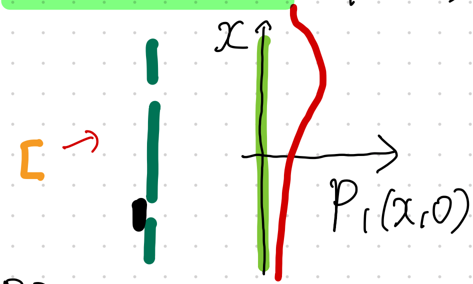
電子線バイプリズム



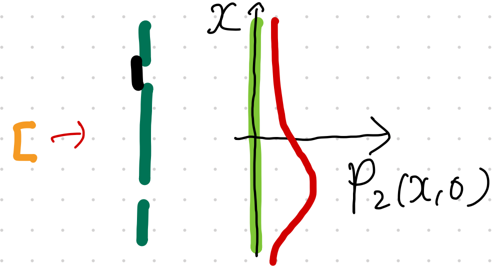
電子があたった位置の動画 → YouTube

(思考)実験の結果

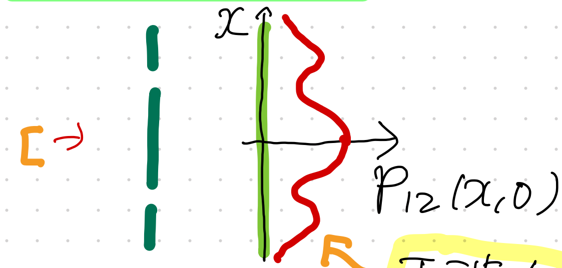
穴1のみあける $P_1(x,y)$



穴2のみあける $P_2(x,y)$



穴1と穴2をあける $P_{12}(x,y)$



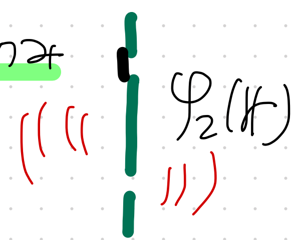
干渉!

解釈

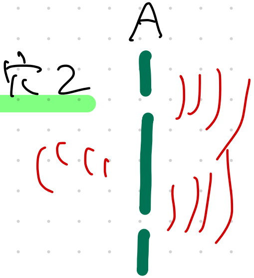
- 初期時刻($t=0$)での電子の波動関数 $\varphi_0(\mathbf{r})$
- 少し後の時刻($t=T$)での波動関数

穴1のみ

穴2のみ



穴1と穴2



$\varphi_{12}(\mathbf{r})$

$= \varphi_1(\mathbf{r}) + \varphi_2(\mathbf{r})$

Aより右側で

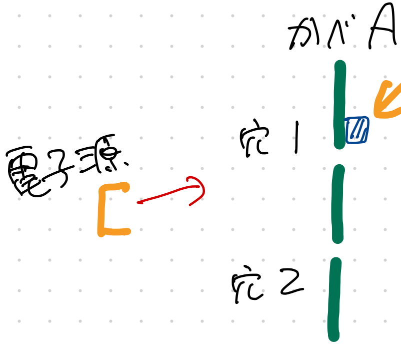
存在確率密度

穴1のみ (1) $P_1(\mathbf{r}) = |\varphi_1(\mathbf{r})|^2$　　穴2のみ (2) $P_2(\mathbf{r}) = |\varphi_2(\mathbf{r})|^2$

穴1と穴2 (3) $P_{12}(\mathbf{r}) = |\varphi_1(\mathbf{r}) + \varphi_2(\mathbf{r})|^2 = P_1(\mathbf{r}) + P_2(\mathbf{r}) + \varphi_1^*(\mathbf{r})\varphi_2(\mathbf{r}) + \varphi_1(\mathbf{r})\varphi_2^*(\mathbf{r})$

干渉項!!

(思考実験のバリエーション　どっちの穴を通ったかこっそり見る



穴1のすぐ横に超高感度の検出器をおく

- 電子が穴1を通ると検出器の状態が変化
- しかし電子の運動はまったく乱されない → 理想化

検出器の状態を見れば電子がどちらの穴を通ったかわかる。

{ 電子を1個だすごとに検出器をリセットする。}

2粒子の量子力学を使ってなにがおきるかを解析

検出器をひとつの粒子とする（簡単のため）　位置 $\boldsymbol{r}'$

(1)　t=0での状態 $\psi_0(\boldsymbol{r}')$ → t=Tでの状態

$\begin{cases} \psi_0(\boldsymbol{r}') & \text{電子を検出しない} \\ \psi_1(\boldsymbol{r}') & \text{電子を検出した} \end{cases}$

(2)　$\int d^3r' \, |\psi_0(\boldsymbol{r}')|^2 = \int d^3r' \, |\psi_1(\boldsymbol{r}')|^2 = 1$

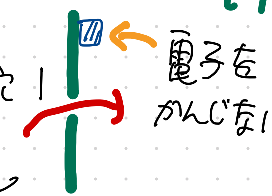
(3)　$\int d^3r' \, \psi_0^*(\boldsymbol{r}') \psi_1(\boldsymbol{r}') = 0$　（直交性）

t=0での全系の状態　(4)　$\Psi_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \varphi_0(\boldsymbol{r}) \, \psi_0(\boldsymbol{r}')$

電子　検出器

検出器が穴から離れている場合　穴は両方あいている

t=T での状態　(1) $\Psi_{off}(x,x') = \underbrace{\{\varphi_1(x)+\varphi_2(x)\}}_{\text{もとの話と同じ}}\underbrace{\psi_0(x')}_{\text{変化なし}}$



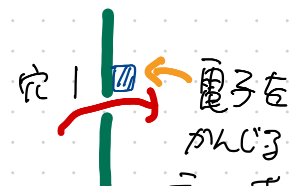
電子の存在確率密度

(2) $P_{off}(x) = \int d^3x' |\Psi_{off}(x,x')|^2 = |\varphi_1(x)+\varphi_2(x)|^2 \int d^3x' |\psi_0(x')|^2$

p5-(6)

$= |\varphi_1(x)+\varphi_2(x)|^2 = P_{12}(x)$ ← 前と同じ

$\boxed{\text{干渉!}}$



検出器が正しく設置されている場合　穴は両方あいている

t=T での状態　(3) $\Psi_{on}(x,x') = \varphi_1(x)\overset{\text{変化}}{\boxed{\psi_1(x')}} + \varphi_2(x)\overset{\text{変化なし}}{\boxed{\psi_0(x')}}$

電子のそれぞれの状態は前と同じ

電子の存在確率密度

(2) $P_{on}(x) = \int d^3x' |\Psi_{on}(x,x')|^2$

$= \int d^3x' \{\varphi_1^*(x)\psi_1^*(x') + \varphi_2^*(x)\psi_0^*(x')\}\{\varphi_1(x)\psi_1(x') + \varphi_2(x)\psi_0(x')\}$

電子の存在確率密度

(1) $P_{on}(r) = \int d^3r' \, |\Phi_{on}(r,r')|^2$

$$= \int d^3r' \{\varphi_1^*(r)\psi_1^*(r') + \varphi_2^*(r)\psi_0^*(r')\}\{\varphi_1(r)\psi_1(r') + \varphi_2(r)\psi_0(r')\}$$

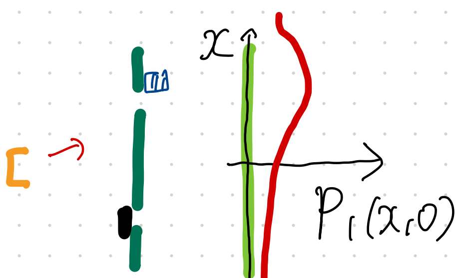
$$= |\varphi_1(r)|^2 \underbrace{\int d^3r' \, |\psi_1(r')|^2}_{=1} + |\varphi_2(r)|^2 \underbrace{\int d^3r' \, |\psi_0(r')|^2}_{=1}$$

$$+ \varphi_1^*(r)\varphi_2(r) \underbrace{\int d^3r' \, \psi_1^*(r')\psi_0(r')}_{=0} + \varphi_2^*(r)\varphi_1(r) \underbrace{\int d^3r' \, \psi_0^*(r')\psi_1(r')}_{=0}$$

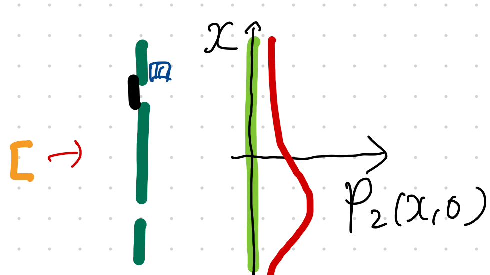
$$= |\varphi_1(r)|^2 + |\varphi_2(r)|^2 = P_1(r) + P_2(r)$$ ← 干渉が消えた!!

古典的な粒子と同じ

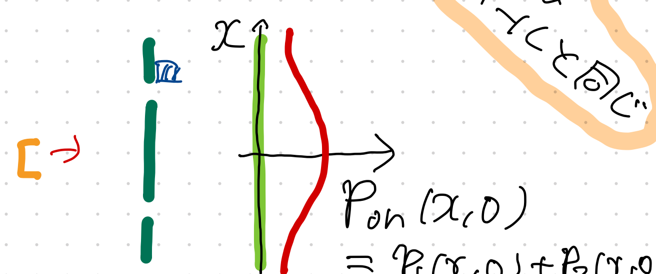
穴1のみあける



穴2のみあける



穴1と穴2をあける



本質的なのはエンタングルメント

(1) $\Psi_{\mathrm{off}}(x, x') = \{\varphi_1(x) + \varphi_2(x)\}\,\psi_0(x')$ エンタングルメントなし

(2) $\Psi_{\mathrm{on}}(x, x') = \varphi_1(x)\,\psi_1(x') + \varphi_2(x)\,\psi_0(x')$

電子と検出器の状態がエンタングルしている!

注 実際の実験系では検出器と相互作用すれば電子の運動はかならず乱される $\varphi_1(x) \to \varphi_1'(x)$

上の考察から、この乱れをどんなに小さくしても干渉は復活しないと結論できる。

問 P10-(3)のかわりに (3) $\int d^3x'\, \psi_0^*(x')\,\psi_1(x') = \alpha \neq 0$

としたら $P_{\mathrm{on}}(x)$ はどうなるだろう? 干渉は??

§水素原子のより正確な取り扱い

→ 相対論効果などは入っていない。
(もっと正確な扱いもできている)

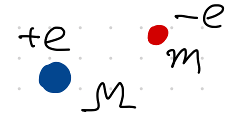
水素原子は2体問題

電子　質量 m　位置 $\boldsymbol{r}'=(x',y',z')$

＋

原子核　質量 M　位置 $\tilde{\boldsymbol{r}}=(\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z})$

ふつうの水素なら陽子
重水素なら陽子＋中性子



状態は波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}',\tilde{\boldsymbol{r}})$ で表現

▷ Schrödinger方程式

古典力学でのエネルギー

(1) $$E=\frac{|\boldsymbol{p}'|^2}{2m}+\frac{|\tilde{\boldsymbol{p}}|^2}{2M}-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{|\boldsymbol{r}'-\tilde{\boldsymbol{r}}|}$$

1粒子のときと同じように演算子におきかえる

(2) $$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta'-\frac{\hbar^2}{2M}\tilde{\Delta}-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{|\boldsymbol{r}'-\tilde{\boldsymbol{r}}|}$$

$$\Delta'=\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2}{\partial y'^2}+\frac{\partial^2}{\partial z'^2},\qquad \tilde{\Delta}=\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2}+\frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2}+\frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2}$$

定常状態のSchrödinger方程式

(3) $$\boxed{\hat{H}\Psi(\boldsymbol{r}',\tilde{\boldsymbol{r}})=E\Psi(\boldsymbol{r}',\tilde{\boldsymbol{r}})}$$

▷ 重心と相対座標への かきかえ → 古典力学(Kepler問題)で役立った!

重心 (1) $\mathbf{R} = (X, Y, Z) = \dfrac{m\mathbf{r}' + M\tilde{\mathbf{r}}}{m+M}$

相対座標, (2) $\mathbf{r} = (x, y, z) = \mathbf{r}' - \tilde{\mathbf{r}}$

原子核からみた電子の位置

ベタに変数変換 (3) $X = \dfrac{mx' + M\tilde{x}}{m+M}$, $x = x' - \tilde{x}$

$$(4) \quad \frac{\partial}{\partial x'} = \frac{\partial X}{\partial x'}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x'}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{m}{m+M}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x}$$

$$(5) \quad \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} = \frac{\partial X}{\partial \tilde{x}}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial \tilde{x}}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{M}{m+M}\frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x}$$

よって

$$(6) \quad \frac{\partial^2}{\partial x'^2} = \frac{m^2}{(m+M)^2}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2m}{m+M}\frac{\partial^2}{\partial x \partial X}$$

$$(7) \quad \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} = \frac{M^2}{(m+M)^2}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{2M}{m+M}\frac{\partial^2}{\partial x \partial X}$$

消えたらうれしい

$\dfrac{1}{2m} \times (6) + \dfrac{1}{2M} \times (7)$ より

$$(8) \quad \frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{1}{2M}\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} = \frac{1}{2(m+M)}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$\hat{H}$にでてくる形

$\left(\dfrac{1}{m} + \dfrac{1}{M}\right) = \dfrac{1}{\mu}$

μ: 換算質量

よって (1) $\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{|r|}}_{\hat{H}_{rel}\ //\ r\text{のみに依存}} \underbrace{- \frac{\hbar^2}{2(M+m)}\Delta_R}_{\hat{H}_{cm}\ //\ R\text{のみに依存}}$ $\quad \mu = \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)^{-1}$

エネルギー固有状態として (2) $\Psi(r, r') = \varphi(r)\, u(R)$ の形のものを求める

(3) $(\hat{H}_{rel} + \hat{H}_{cm})\, \varphi(r)\, u(R) = E\, \varphi(r)\, u(R)$ は

$$\begin{cases} (4)\ \hat{H}_{rel}\,\varphi(r) = E_{rel}\,\varphi(r) \\ (5)\ \hat{H}_{cm}\, u(R) = E_{cm}\, u(R) \end{cases}$$

の2つに分離 $\quad$ (6) $E = E_{rel} + E_{cm}$

- (4) は (6) $\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{|r|}\right)\varphi(r) = E_{rel}\,\varphi(r)$ ← 量子力学2でといた!
- (5) は 自由粒子

(無限空間では自由粒子のエネルギー固有値はないので、ちょっとごまかしてる。)

<同種粒子の系>

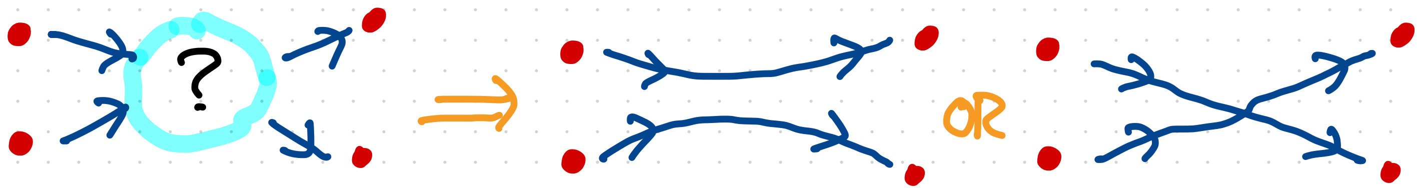
§基本原理

原理的に in priciple ＝ 実験技術などの問題ではない

（量子力学では）同種粒子は原理的に区別できない

区別できる ⟷ 2つ(以上)の粒子に一貫した「名前」をつけて時間発展を追いつづけることが可能

2つの電子
同じスピン



- 区別できるなら、この2つのどちらか!
- 実際はどちらでもない → 2つの重ね合わせ!

▷ あたりまえの理由で(さしあたっては)区別できる場合

2つの電子が遠く離れている、2つの電子のスピンが逆向き

→ いずれ区別できなくなるかもしれない

▷「同種粒子が区別できない」のは数多くの実験で確認された事実!!

マクロな物体との比較

マクロな物体 ← 区別できる	量子力学的粒子 ← 区別できない
● どんなに似ていても わずかなちがいがある（キズとか） それで区別できる	● 同じ内部状態をとる同種粒子は 完全に同じもの ● 内部状態は「とびとび」 1s状態のH原子はみな同じ！ （スピン状態も同じなら）
● ちがいがわからなくても，粒子の運動をずっと追跡していれば，それで区別できる	● 粒子の位置を測定しているとそれで運動が変化してしまう

マクロ物理と量子物理の境界は？

複数の素粒子からなる粒子や物体でも 完全に同じ素粒子から完全に同じように作られたものが 完全に同じ内部状態をとっていれば 区別できない

マクロ系での実現はきわめて困難

明確な境界はない。

§波動関数の対称性

2つの同種粒子　仮に粒子1，2と呼ぶ　状態 $\Psi(r_1, r_2)$

2粒子の区別がつかない → 2つの粒子の「名前」をいれかえても同じ物理的状態

波動関数 $\Psi(r_1, r_2)$ と 波動関数 $\Psi(r_2, r_1)$ は同じ物理的状態

$\boxed{\text{複素定数 } \alpha \text{ があって任意の } r_1, r_2 \text{ について (1) } \Psi(r_1, r_2) = \alpha\,\Psi(r_2, r_1)}$

r_1, r_2 が任意だから　(2) $\Psi(r_2, r_1) = \alpha\,\Psi(r_1, r_2) = \alpha^2\,\Psi(r_2, r_1)$

(3) $\boxed{\alpha^2 = 1}$ → (4) $\alpha = \pm 1$ → この世界の粒子は2種類に分類される！

▷ $\alpha = 1$ boson ボース粒子

(5) $\Psi(r_1, r_2) = \Psi(r_2, r_1)$　　波動関数は対称

▷ $\alpha = -1$ fermion フェルミ粒子

(6) $\Psi(r_1, r_2) = -\Psi(r_2, r_1)$　　波動関数は反対称

波動関数の対称性

Ⅲ boson と fermion

	fermion	boson
素粒子	クォーク, 電子, ニュートリノ, …	光子, W boson, Z boson, gluon Higgs粒子
複合粒子	フェルミオン奇数個 + ボソン 陽子, 中性子 Aが奇数個の原子核 A+Zが奇数個の原子	フェルミオン偶数個 + ボソン 中間子 Aが偶数個の原子核 A+Zが偶数個の原子

A 質量数（陽子と中性子の総数）
Z 原子番号（電子の総数）

§相互作用のない同種2粒子系のエネルギー固有状態

▷準備　ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ 中の質量 m の1粒子

エネルギー固有値と固有状態が求まったとする

$$(1)\quad \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\mathbf{r})\right\}\psi_j(\mathbf{r})=\epsilon_j\,\psi_j(\mathbf{r})\qquad j=1,2,\cdots$$

ϵ_j　1粒子エネルギー固有値

$\psi_j(\mathbf{r})$　1粒子エネルギー固有状態

$$(2)\quad \int d^3r\,\psi_j^*(\mathbf{r})\,\psi_\ell(\mathbf{r})=\delta_{j,\ell}$$

▷相互作用のない同種2粒子系

古典力学のエネルギー

$$(3)\quad E=\underbrace{\frac{|\mathbf{p}_1|^2}{2m}}_{\text{粒子1}}+V(\mathbf{r}_1)+\underbrace{\frac{|\mathbf{p}_2|^2}{2m}}_{\text{粒子2}}+V(\mathbf{r}_2)+\underbrace{\cancel{V_{int}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)}}_{\text{相互作用}}$$

対応する量子力学系のハミルトニアン

$$(4)\quad \hat{H}=\hat{H}_1+\hat{H}_2$$

$$(5)\quad \hat{H}_1=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1+V(\mathbf{r}_1)\qquad \Delta_1=\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_1^2}$$

$$(6)\quad \hat{H}_2=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2+V(\mathbf{r}_2)\qquad \Delta_2=\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_2^2}$$

Schrödinger方程式 (1) $\hat{H}\,\Psi(x_1,x_2)=E\,\Psi(x_1,x_2)$ 　Eと$\Psi(x_1,x_2)$をセットで求める!

(2) $\Psi(x_1,x_2)=\psi_j(x_1)\psi_\ell(x_2)$ としてみよう

(3) $$\hat{H}\psi_j(x_1)\psi_\ell(x_2)=(\hat{H}_1+\hat{H}_2)\psi_j(x_1)\psi_\ell(x_2)$$
$$=\underbrace{\left(\hat{H}_1\psi_j(x_1)\right)}_{\epsilon_j\psi_j(x_1)}\psi_\ell(x_2)+\psi_j(x_1)\underbrace{\hat{H}_2\psi_\ell(x_2)}_{\epsilon_\ell\psi_\ell(x_2)}=(\epsilon_j+\epsilon_\ell)\psi_j(x_1)\psi_\ell(x_2)$$

$E=\epsilon_j+\epsilon_\ell$ として(1)を満たす　BUT boson, fermionの対称性は満たさない!

ところで　(4) $\hat{H}\psi_j(x_2)\psi_\ell(x_1)=(\epsilon_j+\epsilon_\ell)\psi_j(x_2)\psi_\ell(x_1)$

いれかえた　　(3)と同じ! → $\boxed{\text{縮退している}}$

よって任意の $\alpha,\beta\in\mathbb{C}$ について

(5) $$\hat{H}\{\alpha\psi_j(x_1)\psi_\ell(x_2)+\beta\psi_j(x_2)\psi_\ell(x_1)\}$$
$$=(\epsilon_j+\epsilon_\ell)\{\alpha\psi_j(x_1)\psi_\ell(x_2)+\beta\psi_j(x_2)\psi_\ell(x_1)\}$$

α,β をうまく選べばよさそう

boson系のエネルギー固有状態

(1) $\Phi^{\mathrm{boson}}_{j,l}(x_1,x_2) = \begin{cases} \psi_j(x_1)\psi_j(x_2) & j=l\text{のとき} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_j(x_1)\psi_l(x_2)+\psi_j(x_2)\psi_l(x_1)\} & j<l\text{のとき} \end{cases}$

状態の名称
(ひとつは1粒子状態 j, もうひとつは l)

かぞえすぎを防ぐため
(2) $\Phi^{\mathrm{boson}}_{j,l}(x_1,x_2) = \Phi^{\mathrm{boson}}_{l,j}(x_1,x_2)$ に注意

エネルギー固有値

(3) $\hat{H}\Phi^{\mathrm{boson}}_{j,l}(x_1,x_2) = (\epsilon_j+\epsilon_l)\Phi^{\mathrm{boson}}_{j,l}(x_1,x_2)$

エネルギー固有状態

(4) $\Phi^{\mathrm{boson}}_{j,l}(x_1,x_2) = \Phi^{\mathrm{boson}}_{j,l}(x_2,x_1)$

対称

fermion系のエネルギー固有状態

(5) $\Phi^{\mathrm{fermion}}_{j,l}(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_j(x_1)\psi_l(x_2)-\psi_j(x_2)\psi_l(x_1)\}$ $\quad j<l$

$j=l$ はない! → Pauliの排他律

エネルギー固有値

(6) $\hat{H}\Phi^{\mathrm{fermion}}_{j,l}(x_1,x_2) = (\epsilon_j+\epsilon_l)\Phi^{\mathrm{fermion}}_{j,l}(x_1,x_2)$

エネルギー固有状態

(7) $\Phi^{\mathrm{fermion}}_{j,l}(x_1,x_2) = -\Phi^{\mathrm{fermion}}_{j,l}(x_2,x_1)$

反対称

§N粒子系への拡張

N個の同種粒子 (仮の名前) $1, 2, \cdots, N$ 波動関数 $\Psi(x_1, \cdots, x_N)$

名前のいれかえ (置換) (1) $P: (1, 2, \cdots, N) \to (P(1), P(2), \cdots, P(N))$

▷波動関数の対称性

任意のPと$x_1, \cdots, x_N$について
- boson (2) $\Psi(x_1, x_2, \cdots, x_N) = \Psi(x_{P(1)}, x_{P(2)}, \cdots, x_{P(N)})$
- fermion (3) $\Psi(x_1, x_2, \cdots, x_N) = (-1)^P \Psi(x_{P(1)}, x_{P(2)}, \cdots, x_{P(N)})$

$(-1)^P$ → 置換のパリティ

▷相互作用のない系のハミルトニアン (4) $\hat{H} = \sum_{n=1}^{N} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_n + V(x_n) \right\}$ の固有状態

(5) $$\boxed{\Psi^{\text{boson}}_{j_1, \cdots, j_N}(x_1, \cdots, x_N) = \text{const.} \sum_P \psi_{j_1}(x_{P(1)}) \psi_{j_2}(x_{P(2)}) \cdots \psi_{j_N}(x_{P(N)})}$$

ただし $j_1 \leq j_2 \leq \cdots \leq j_N$

$\sum_P$ ← N! 通りの置換すべてについての和

(6) $$\boxed{\Psi^{\text{fermion}}_{j_1, \cdots, j_N}(x_1, \cdots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \psi_{j_1}(x_{P(1)}) \psi_{j_2}(x_{P(2)}) \cdots \psi_{j_N}(x_{P(N)})}$$

ただし $j_1 < j_2 < \cdots < j_N$ → Pauliの排他律

エネルギー固有値 (7) $E = \sum_{n=1}^{N} \epsilon_{j_n}$

§ 参考　生成・消滅演算子の方法

別名「第2量子化の方法」 → もう1回「量子化」するわけではない.

同種粒子系で粒子に名前をつけずに状態や演算子を表現する方法

波動関数を使った方法と完全に等価

$|\Phi_{vac}\rangle$「真空」　粒子がひとつもない状態　$\|\Phi_{vac}\| = 1$

$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$ 位置 $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$ に粒子をひとつ作る演算子

$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})|\Phi_{vac}\rangle$　位置 $\mathbf{r}$ に粒子がいる状態

$\psi^\dagger(\mathbf{r})\,\psi^\dagger(\mathbf{r}')\,|\Phi_{vac}\rangle$ 位置 $\mathbf{r}$ と $\mathbf{r}'$ に粒子がいる状態

→ 詳しくは田崎による解説を!