

多体系の量子力学的記述

(A) 無限個の粒子から構成される多粒子系
金属中の電子集団

(B) 有限個の粒子から構成される多粒子系

(B1) 異種の粒子から構成される有限多粒子系
(B1-1) 孤立した異種多粒子系

1 電子 1 陽子系としての水素原子、
異種原子からなる 2 原子分子 (CO など)
1 陽子 1 中性子系としての重陽子

(B1-2) 外場の中の異種多粒子系
外部磁場 (または電場) の中の水素原子

(B2) 同種の粒子から構成される有限多粒子系

(B2-1) 孤立した同種多粒子系
核子の多体系としての原子核 (核子 = 陽子、中性子の総称)
金属原子クラスター

(B2-2) 外場の中の同種多粒子系

He 原子中の 2 電子系
人工原子中の有限多電子系 (量子ドット)

半導体界面における有限電子系

(A) 無限個の粒子から構成される多粒子系

金属中の電子集団

固体が金属か絶縁体であるかは、固体内の電子の運動状態により決まる。

(1) 固体内で電子が感ずるポテンシャルが一定値 V_0 の場合:

自由電子ガス模型(フェルミガス模型)

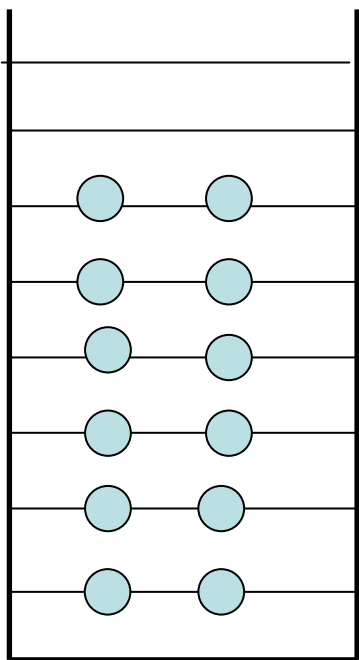
自由電子に対して長さ L の周期的境界条件を設定すると、
電子の固有関数は平面波となる。(簡単のため、1次元の場合を考える)

$$\phi_k(x) = \frac{\exp(-ikx)}{\sqrt{L}}, \quad (k = \frac{2\pi}{L}n, n = 0, 1, 2, \dots)$$

固有エネルギー

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 + V_0 \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

固有エネルギーは一般には離散的であるが、
長さ L が十分に大きければ、連続的な値をとる。



$$E_F = \frac{\hbar^2 (k_F)^2}{2m} : \text{フェルミ・エネルギー}$$

$$p_F \equiv \hbar k_F : \text{フェルミ運動量}$$

(2) 固体内で電子が感ずるポテンシャルが原子近傍に限定される場合： 電子状態のバンド理論

1次元(長さ L)で、同じ原子が等間隔 a (=格子定数)で並び、
周期的ポテンシャルが作用すると仮定。 $V(x+a)=V(x)$

$$\phi_k(L) = \phi_k(0); (L = Na)$$

$$\phi_k(x+a) = c\phi_k(x); (|c|=1)$$

$$\rightarrow \phi_k(x+a) = e^{ikx}\phi_k(x): \text{Blochの定理}$$

$$\phi_k(x): \text{Bloch関数}$$

N 個の原子からなる系で、原子間の重なりが無視できると、
 n 番目の原子の電子の波動関数 $\phi^n(x)[\phi^n(x+a)=\phi^{n-1}(x)]$

$$\phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{ikna} \phi^n(x)$$

孤立系の場合

多粒子系の重心運動は自由粒子の運動(＝古典的運動！)

多粒子系においては内部運動こそが量子力学的運動

例: 水素原子の重心運動は自由粒子的であるが、
電子と陽子の間の相対運動は量子力学的である！！

孤立した2粒子系は重心運動と相対運動は厳密に分離される

孤立した3粒子以上の多粒子系:

重心運動をいかに厳密に、または効率的に分離するかがポイント！！

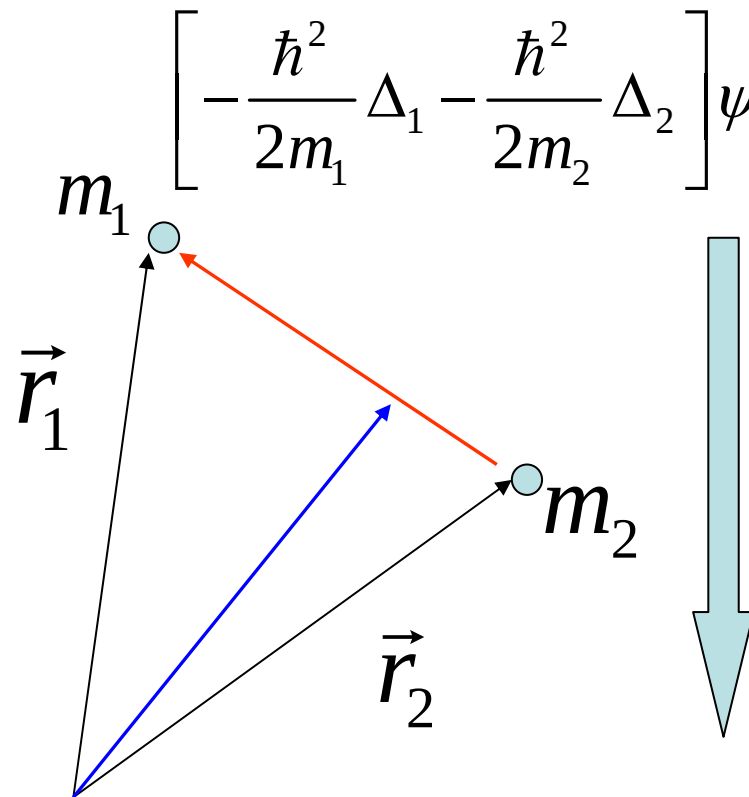
重心運動の混入による架空の効果が内部運動に影響する！！

厳密に分離するにはヤコビ座標(Jacobi coordinates)の導入が不可欠。

(B1)異種の粒子から構成される有限多粒子系

(B1-1)孤立した異種多粒子系

異種原子からなる2原子分子(COなど)


$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$
$$\vec{R} \equiv \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{M}, \vec{r} \equiv \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$
$$M \equiv m_1 + m_2, \mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$
$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = f(\vec{r}) F(\vec{R}), E = E_{\text{rel}} + E_{\text{CM}}$$

ボルン・オッペンハイマー近似

(Born-Oppenheimer approximation)

分子の運動を考える際、原子核の質量は電子の質量の数千倍であるから、

(陽子の質量) = 1840 × (電子の質量)

原子核の運動は比較的ゆっくりで、電子が原子核に相対的に運動している間は「静止」としていると扱ってもよいとみなす。

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_{\text{electron}} + \hat{H}_{\text{electron-nucleus}} + \hat{H}_{\text{nucleus}} \\ &\approx \hat{H}_{\text{electron}} + \hat{H}_{\text{electron-nucleus}}\end{aligned}$$

重心運動

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R F(\vec{R}) = E_{\text{CM}} F(\vec{R})$$
$$\rightarrow F(\vec{R}) = C \exp(-i\vec{P} \cdot \vec{R} / \hbar)$$

平面波 自由粒子的運動

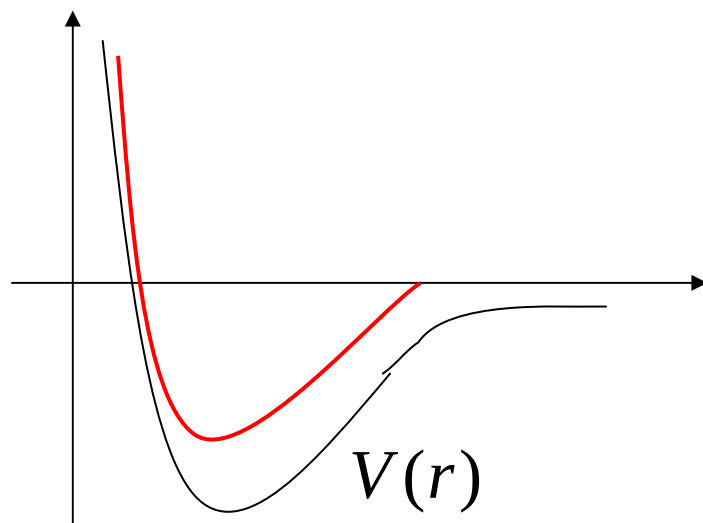
古典的運動

相対運動

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r f(\vec{r}) + V(r) f(\vec{r}) = E_{\text{rel}} f(\vec{r})$$

$$\downarrow f(\vec{r}) = f(r, \theta, \phi) = \frac{R(r)}{r} Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 R_{n\ell}(r)}{dr^2} + \left[\underbrace{V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}}_{\text{遠心力ポテンシャル}} \right] R_{n\ell}(r) = E_{\text{rel}} R_{n\ell}(r)$$



遠心力ポテンシャル

相対運動に対する微小振幅近似

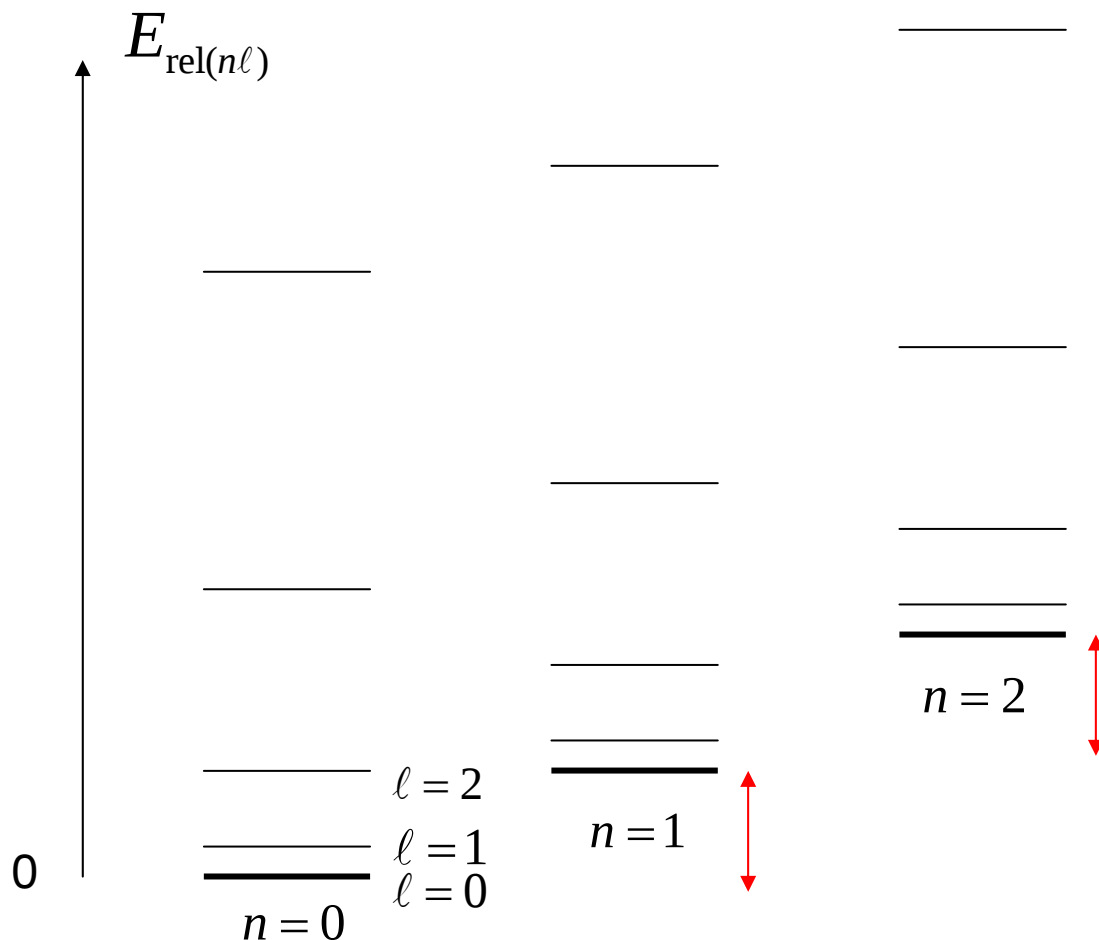
$$\begin{aligned} W(r) &\equiv V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \\ &\cong W_\ell(r_\ell) + \left. \frac{dW_\ell(r_\ell)}{dr} \right|_{r=r_\ell} (r - r_\ell) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2W_\ell(r_\ell)}{dr^2} \right|_{r=r_\ell} (r - r_\ell)^2 + \dots \\ &\cong W_\ell(r_\ell) + \frac{1}{2} \mu(\omega_\ell)^2 x^2 \quad x \equiv r - r_\ell \end{aligned}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 R_{n\ell}}{dx^2} + \left[V(r_\ell) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\Theta_\ell} + \frac{1}{2} \mu \omega_\ell^2 x^2 \right] R_{n\ell} \cong E_{\text{rel}} R_{n\ell}$$

$$\Theta_\ell \equiv \mu r_\ell^2 \quad : \text{慣性モーメント}$$

回転-振動スペクトル

$$E_{\text{rel}(n\ell)} = V(r_\ell) + \hbar\omega_\ell\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\Theta_\ell}; n = 0, 1, 2, \dots, \ell = 0, 1, 2, \dots$$



(B2)-1. 同種粒子は互いに区別できない

(同種粒子の不可弁別性)

1. 1原子の大きさ程度以下の領域では、同じ種類の粒子のそれぞれを区別できない。

「同じ種類の粒子」とは、質量、電荷、スピンなどが同じ、物理的な条件が同じであれば、全く同様に振舞う粒子のことをいう。

$$m_e = 0.91093897 \times 10^{-30} \text{ kg}$$

$$e = 1.6021773 \times 10^{-19} \text{ coul}$$

$$\mu = -1.00115962 \mu_B$$

$$\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_e c}$$

運動の軌跡から区別することもできない。

ある時刻で2つの粒子が空間的に異なる場所にいたとしても、時間の経過とともに波動関数が広がってゆき、2つの粒子の存在確率密度は重なっていく！

力学的な性質からも区別することもできない。

運動量が交換するなどの相互作用がある。

(B2)- 1.2 個々の電子や個々のクォークはなぜ互いに瓜二つなのか？

- 粒子はそれ自体独立した存在ではなく、ある量子場の特殊な表れ（「よじれ」）
- 全体的に見れば、量子場はいずこも皆同じ
- 固体のように見える物質も、ぜんぜん場所をとることのない量子場の表れにすぎない。
- 物質粒子とは単に量子場がたまたま集中しているところ、
風呂場の蒸気が凝縮して水滴になるように、物質粒子は場から凝縮して くるのだ。

(B2)- 2. スピン自由度をもつ同種の多粒子系の波動関数の(位置、スピン)交換に対する対称性

$$\psi = \psi(\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2)$$

$$\begin{aligned}\hat{P}_{12}\psi(\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2) &\equiv \psi(\vec{r}_2, s_2, \vec{r}_1, s_1) \\ &= \lambda \psi(\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(\hat{P}_{12})^2\psi(\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2) &= \lambda^2\psi(\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2) \\ \longrightarrow \lambda &= \pm 1\end{aligned}$$

$$\hat{P}_{12}\psi(\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2) = \psi(\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2): \text{対称}$$

$$\hat{P}_{12}\psi(\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2) = -\psi(\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2): \text{反対称}$$

boson 整数スピン

ボース粒子: 光子、フォノン、中間子

フェルミ粒子: 電子、陽子、中性子

fermion 半整数スピン

(B2)- 3. フェルミ粒子に対するパウリの排他原理

1925 W. Pauli

ひとつの量子状態にある電子は1つだけで、複数はありえない。

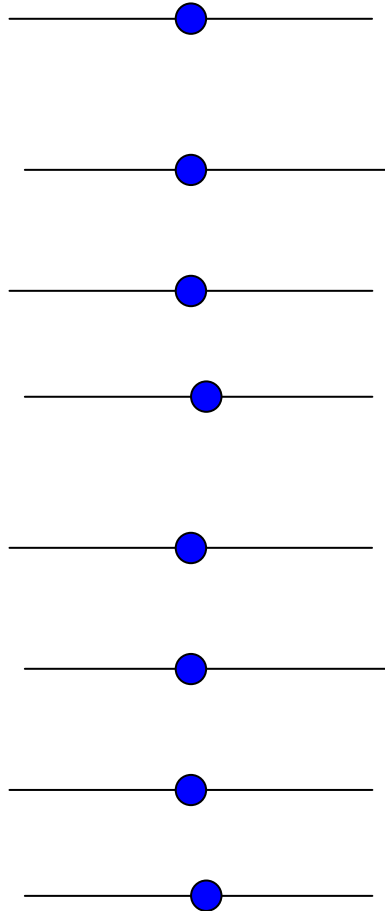
電子の量子状態 $\psi_{n, \ell, m_\ell, m_s}$

n	主量子数
ℓ	軌道角運動量z成分
m_ℓ	方位量子数(軌道角運動量)
m_s	スピンz成分

$$\psi(a, b) = -\psi(b, a) \quad a \equiv \{n_a, \ell_a, m_{\ell a}, m_{s a}\}, b \equiv \{n_b, \ell_b, m_{\ell b}, m_{s b}\}$$

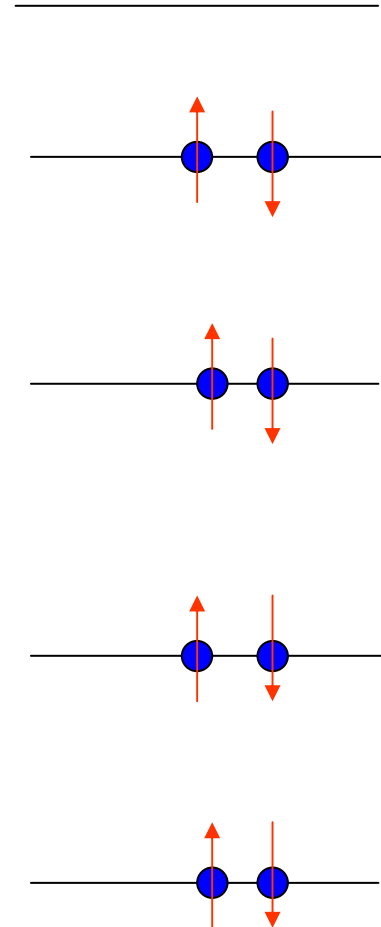
$$\psi(a, a) = -\psi(a, a) \rightarrow \psi(a, a) = 0$$

3.1 フェルミ粒子の量子状態の占有の仕方



スピン状態の縮退がない場合

↑
外部磁場、スピン軌道相互作用



スピン状態の縮退がある場合

3.2 スレーター行列式

フェルミ粒子系に対する反対称規格化状態

$$\int \varphi_a^*(\vec{r}_k, s_k) \varphi_b(\vec{r}_k, s_k) d\vec{r}_k = \delta_{ab} \quad (k=1,2)$$

$$\begin{aligned} \psi_{a_1, a_2}(\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2) &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\varphi_{a_1}(\vec{r}_1, s_1) \varphi_{a_2}(\vec{r}_2, s_2) - \varphi_{a_2}(\vec{r}_1, s_1) \varphi_{a_1}(\vec{r}_2, s_2) \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_{a_1}(\vec{r}_1, s_1) & \varphi_{a_1}(\vec{r}_2, s_2) \\ \varphi_{a_2}(\vec{r}_1, s_1) & \varphi_{a_2}(\vec{r}_2, s_2) \end{vmatrix} \end{aligned}$$

$$\psi_{a_1, a_2}(\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2) = -\psi_{a_1, a_2}(\vec{r}_2, s_2, \vec{r}_1, s_1)$$

$$\iint \psi_{a_1, a_2}^*(\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2) \psi_{b_1, b_2}(\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \delta_{a_1 b_1} \delta_{a_2 b_2} - \delta_{a_1 b_2} \delta_{a_2 b_1}$$

Dirac 表示を用いると2電子状態の性質は簡潔に表現される！

$$\int \varphi_a^*(\vec{r}_k, s_k) \varphi_b(\vec{r}_k, s_k) d\vec{r}_k = \delta_{ab} \quad (k = 1, 2)$$

$$\rightarrow (\varphi_a | \varphi_b) = \delta_{ab},$$

$$|\varphi_{a_1} \varphi_{a_2}\rangle \equiv |\varphi_{a_1}\rangle |\varphi_{a_2}\rangle \quad \leftarrow \begin{array}{l} \text{規格直交化されているが、} \\ \text{反対称化はされていない2電子状態} \end{array}$$

$$\rightarrow (\varphi_{a_1} \varphi_{a_2} | \varphi_{b_1} \varphi_{b_2}) = \delta_{a_1 b_1} \delta_{a_2 b_2},$$

$$|\varphi_{a_1} \varphi_{a_2}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [|\varphi_{a_1} \varphi_{a_2}\rangle - |\varphi_{a_2} \varphi_{a_1}\rangle] \quad \begin{array}{l} \text{規格直交化と反対称化も} \\ \text{されている2電子状態} \end{array}$$

$$\rightarrow \langle \varphi_{a_1} \varphi_{a_2} | \varphi_{b_1} \varphi_{b_2} \rangle = \delta_{a_1 b_1} \delta_{a_2 b_2} - \delta_{a_1 b_2} \delta_{a_2 b_1}$$

いつ反対称化が必要になるか？

地球上にある1個の水素原子と月の上のもう1個の水素原子を考えたとき、
2つの水素原子の2つの電子間に反対称化を考慮する必要があるか？

→ 十分遠方にある電子間の反対称化は考慮する必要はない！

説明： 相関のない2電子系の波動関数 $\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \equiv \varphi_a(\vec{r}_1)\varphi_b(\vec{r}_2)$

反対称化された2電子系の波動関数

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \equiv \frac{1}{N} [\varphi_a(\vec{r}_1)\varphi_b(\vec{r}_2) - \varphi_b(\vec{r}_1)\varphi_a(\vec{r}_2)]$$

$$1 = \iint \Psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

$$\rightarrow N^2 = 2 \left(1 + \left| \int \varphi_a^*(\vec{r}_1) \varphi_b(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \right|^2 \right) \equiv 2 \left(1 + |S_{ab}|^2 \right),$$

$$S_{ab} \equiv \int \varphi_a^*(\vec{r}_1) \varphi_b(\vec{r}_1) d\vec{r}_1$$

ラベルaの電子がある空間領域 V_a に存在する確率

相関のない波動関数の場合

$$P(V_a) \equiv \iint_{V_a} \Phi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \int_{V_a} |\varphi_a(\vec{r}_1)|^2 d\vec{r}_1$$

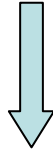
ラベルbの電子の座標についての積分は全領域について実行

反対称化された波動関数の場合

$$\begin{aligned} P_{antisym}(V_a) &\equiv \int_{V_a} \int_{V_a} \Psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \\ &= \frac{2}{N^2} \int_{V_a} |\varphi_a(\vec{r}_1)|^2 d\vec{r}_1 - \frac{2}{N^2} \int_{V_a} \varphi_a^*(\vec{r}_1) \varphi_b(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \int_{V_a} \varphi_b^*(\vec{r}_2) \varphi_a(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 \end{aligned}$$

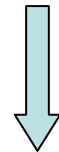
ラベルaは、そのラベルをもつ両方の波動関数に現れているために、干渉項は領域 V_a にわたる両方の積分をもつ。

領域 V_a に存在する確率が、相関のない場合と反対称化された場合で相違が顕著になるのは、重なり積分が変数の領域 V_a において重要であるときのみである。



(基底状態の)波動関数は束縛状態に対しては指数関数的に減少するので、この重なり積分が重要になるのは、原子がお互いに非常に接近している場合のみである。

$$\varphi_a(x) = e^{-\beta x^2}, \varphi_b(x) = e^{-\beta(x-L)^2}$$


$$\rightarrow \int_{V_a} \exp[-\beta x^2 - \beta(x-L)^2] dx \propto \exp(-\beta L^2 / 2)$$
$$\rightarrow 0 \quad (\text{as } L \rightarrow \infty)$$

パウリ原理は原子や分子において考慮されるべきものであるが、原子が十分に離れている場合に状況では考慮する必要はない。

原子間隔が数オングストロームである結晶格子においてさえ、重なり積分はしばしば小さくて、反対称化は不要である。

水素原子の平均半径としてのボーア半径 $a_B \approx 0.53\text{\AA}$

3.3 Nフェルミ粒子系

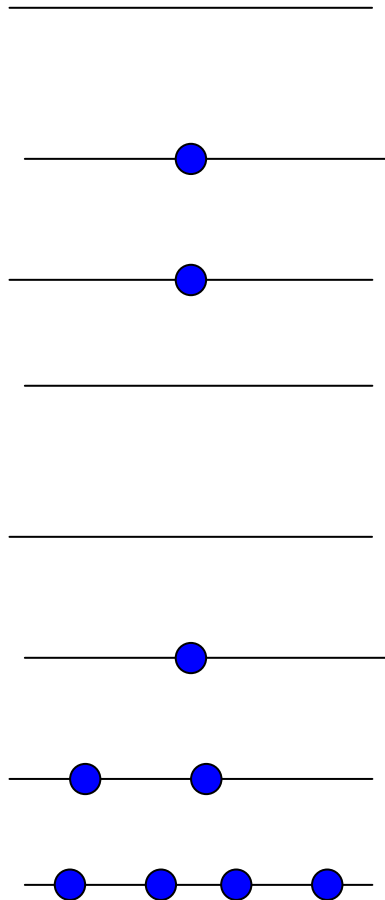
$$\begin{aligned}
 \hat{P}_{k\ell} \psi(\xi_1, \dots, \xi_k, \dots, \xi_\ell, \dots, \xi_N) \\
 &\equiv \psi(\xi_1, \dots, \xi_\ell, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N) \\
 &= -\psi(\xi_1, \dots, \xi_k, \dots, \xi_\ell, \dots, \xi_N)
 \end{aligned}$$

$$(\vec{r}_k, s_k) \equiv \xi_k$$

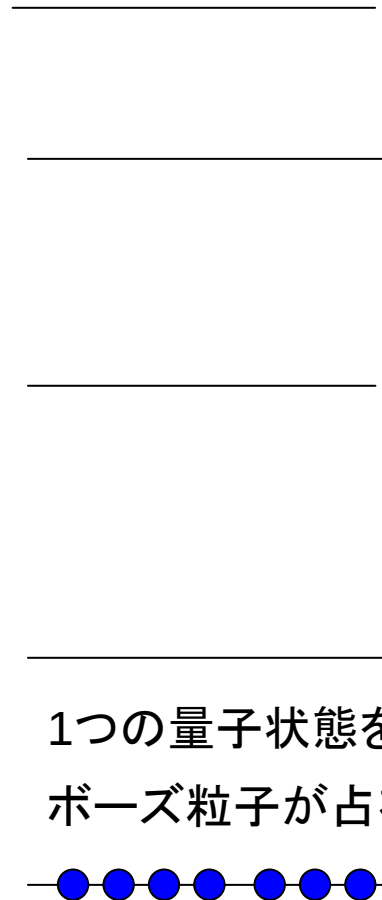
$$\int \varphi_a^*(\vec{r}_k, s_k) \varphi_b(\vec{r}_k, s_k) d\vec{r}_k = \delta_{ab} \quad (k=1, 2, \dots, n)$$

$$\psi_{a_1 \dots a_N}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{a_1}(\xi_1) & \varphi_{a_1}(\xi_2) & \cdots & \varphi_{a_1}(\xi_N) \\ \varphi_{a_2}(\xi_1) & \varphi_{a_2}(\xi_2) & \cdots & \varphi_{a_2}(\xi_N) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \varphi_{a_N}(\xi_1) & \varphi_{a_N}(\xi_2) & \cdots & \varphi_{a_N}(\xi_N) \end{vmatrix}$$

4. ボーズ粒子の量子状態の占有の仕方



ボーズ粒子(ボゾン)はひとつの状態を複数の粒子が占有できる



1つの量子状態を莫大な個数の
ボーズ粒子が占有することも可能！

ボーズ・アインシュタイン凝縮(BEC)

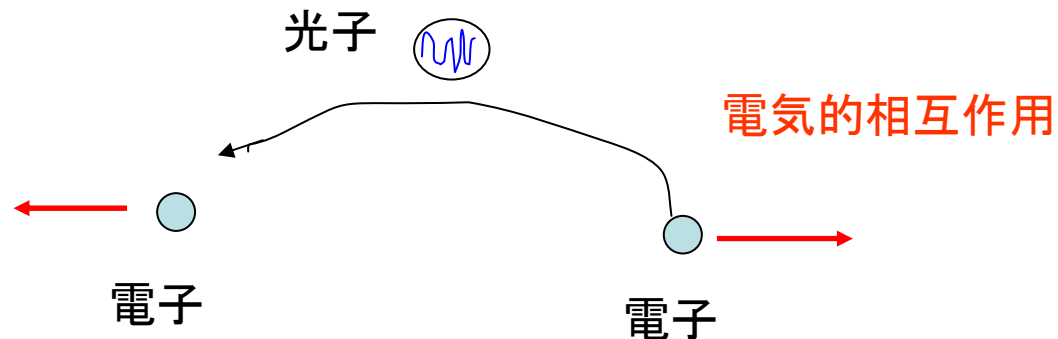
フェルミ型粒子とボース型粒子の役割分担と関連

- 物質を構成する粒子: フェルミ粒子
電子、陽子、中性子、クォーク

相互作用を媒介する粒子: ボース粒子

光子(フォトン、photon)、フォノン(振動量子、phonon)、中間子

ボース型粒子の交換による(フェルミ型)粒子間の相互作用の生成



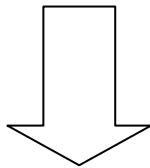
人間の世界における類似的対応

劇場、電車内の座席指定: 1つの席には0または1人のみ着席
座席は二つ以上のラベルで区別される。

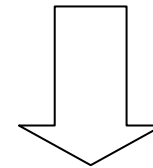
家庭内、社会的組織内における役割交換などは重要な効果を生じる

富,物(資源)の偏在

プレゼント交換による人間関係の発生、強化(または反発!)



人間はフェルミ粒子的?!



お金(プレゼント)はボソン粒子的?!

座席を区別するラベルは状態を定義する量子数に対応する!?

複合粒子の量子統計性

ファルミ粒子の偶数個から構成される複合粒子: ボーズ粒子

He4原子 = 陽子2個 + 中性子2個 + 電子2個 = フェルミ粒子6個

————→ 約 2K 以下で超流動という非常に興味深い
状態になる

ファルミ粒子の奇数個から構成される複合粒子: フェルミ粒子

He3原子 = 陽子2個 + 中性子1個 + 電子2個 = フェルミ粒子5個

————→ 3mK 以下と 1000分の1 も低い温度で
超流動状態になる