

ある  $\ell$  の値に対し、 $2\ell + 1$  個の演算子  $T_m^\ell$  ( $-\ell \leq m \leq \ell$ ) が角運動量と次の交換関係を満たすとき、これらはランク  $\ell$  の既約テンソルであると定義される。

$$[J_z, T_m^\ell] = mT_m^\ell, \quad [J_\pm, T_m^\ell] = \sqrt{(\ell \mp m)(\ell \pm m + 1)}T_{m\pm 1}^\ell$$

既約テンソルの例として、角運動量の演算子から次のようにして得られる 3 個の演算子  $T_m^1$  ( $m = -1, 0, 1$ ) を定義してみよう。

$$T_1^1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}J_+, \quad T_0^1 = J_z, \quad T_{-1}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}J_-$$

このとき、角運動量の演算子とこれらの演算子との間に次の交換関係が成り立つ。

$$\begin{aligned} [J_z, T_0^1] &= 0, & [J_z, T_{\pm 1}^1] &= \pm T_{\pm 1}^1 \\ [J_+, T_{-1}^1] &= \frac{1}{\sqrt{2}}[J_+, J_-] = \sqrt{2}T_0^1, & [J_+, T_0^1] &= [J_+, J_z] = -J_+ = \sqrt{2}T_1^1 \\ [J_-, T_1^1] &= -\frac{1}{\sqrt{2}}[J_-, J_+] = \sqrt{2}T_0^1, & [J_-, T_0^1] &= [J_-, J_z] = J_- = \sqrt{2}T_{-1}^1 \end{aligned}$$

つまり、これら 3 個の角運動量成分はランク 1 の既約テンソルであることがわかる。同様に、座標の演算子から次のような 3 個の演算子を定義すると、これらも同様にランク 1 の既約テンソルであることがわかる。

$$r_1^1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy), \quad r_0^1 = z, \quad r_{-1}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy)$$

2 つの角運動量  $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2$  の合成に関係し、個別の  $\mathbf{J}_i$  に関する固有状態の積は、合成された角運動量  $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$  に関する固有状態として次のように展開することができる。

$$|\ell_1 m_1\rangle |\ell_2 m_2\rangle = \sum_{\ell=|\ell_1-\ell_2|}^{\ell_1+\ell_2} C(\ell_1 m_1 \ell_2 m_2; \ell m) |\ell m\rangle \quad (59)$$

右辺に現れる係数  $C(\ell_1 m_1 \ell_2 m_2; \ell m)$  は  $m = m_1 + m_2$  のときだけ値を持ち、クレブッシュ・ゴルダン (Clebsch-Gordan) 係数と呼ばれている。

テンソル演算子が角運動量に作用した結果について、(59) と同様な性質の成り立つことが知られている。つまり、次のような展開が成り立つ。

$$T_{m_1}^{\ell_1} |\ell_2 m_2\rangle \propto \sum_{\ell=|\ell_1-\ell_2|}^{\ell_1+\ell_2} c_{\ell \ell_1 \ell_2} C(\ell_1 m_1 \ell_2 m_2; \ell m) |\ell m\rangle$$

これは Wigner-Eckert の定理として知られている。これを利用して、(58) に行列要素についての選択則を導くことができる。行列表素に現れる座標がランク 1 の既約テンソルと考えられることから、終状態と始状態の角運動量の固有値の間に  $|\ell_i - 1| \leq \ell_f \leq \ell_i + 1$ ,  $m_f - m_i = 0, \pm 1$  の関係が成り立つことがわかる。

## 5 多粒子系の量子力学

1 個の粒子だけを含まる系と複数の粒子を含まる系の量子力学には本質的な違いがある。このような違いが生ずる理由について述べ、複数の粒子を含まる系を量子力学的に取り扱う方法について説明するのがこの節の目的である。複数の粒子を含まる系で特に問題となるのは、同じ種類の粒子が含まれている場合である。1 粒子系の量子化は、すでに説明したように粒子の波動性に関係するものである。粒子を記述する状態が波動の性質を示すことから物理量は演算子と考えられ、一般に演算子の間には何らかの交換関係が存在する。このような量子化とこれら説明する量子化とを区別するために、前者を第 1 量子化と呼ぶことがある。一方、これから問題となる量子化は第 2 量子化と呼ばれている。

物質科学においては、特に電子のふるまいが物質の性質を決める上で大きな役割を果たしている。したがって、これから問題になる粒子は主に電子を考えることにする。

### 5.1 多粒子系のハミルトニアンと状態の対称性

互いに区別つかない粒子が複数含まれている系について考えてみよう。ただし、簡単のために含まれる粒子は 1 種類だけとする。この系のハミルトニアンは一般に次のように表されると考えられる。

$$H = H_0 + H'$$
$$H_0 = \sum_i H_{0i} = \sum_i \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V(\mathbf{r}_i) \right]$$

第 2 項の  $H'$  は粒子間の相互作用を表すものとし、複数の粒子に関係する変数を含むものとする。多粒子系の問題は、次の固有値方程式の解を求める問題である。

$$H\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) = E\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) \quad (60)$$

$\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$  はすべての粒子の座標  $\xi$  ( スピン変数を含む ) についての多体系の波動関数である。第 2 項の相互作用が存在しない場合、各粒子についての変数だけを含むハミルトニアン  $H_{0i}$  の固有状態として次の固有値問題、

$$H_{0i}\psi_k(\mathbf{r}_i) = \varepsilon_k\psi_k(\mathbf{r}_i)$$

の解  $\psi_k(\xi_i)$  がすでにわかっているとしてみよう。この時、これらの波動関数の次のような積は、ハミルトニアン  $H_0$  の固有状態であることがわかる。

$$\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) = \psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi_2)\cdots \quad (61)$$

固有値の値は、 $E = \sum_i \varepsilon_{k_i}$  で与えられる。例えば、2 つの粒子を含まる系で、各粒子について次の 1 粒子の場合の固有値問題の解が得られていたとする。

$$H_i\phi_a(\mathbf{r}_i) = \varepsilon_a\phi_a(\mathbf{r}_i), \quad H_i\phi_b(\mathbf{r}_i) = \varepsilon_b\phi_b(\mathbf{r}_i)$$

これらの波動関数の積について、次の式が成り立つ。

$$\begin{aligned} (H_1 + H_2)\phi_a(\mathbf{r}_1)\phi_b(\mathbf{r}_2) &= [H_1\phi_a(\mathbf{r}_1)]\phi_b(\mathbf{r}_2) + \phi_a(\mathbf{r}_1)H_2\phi_b(\mathbf{r}_2) \\ &= (\varepsilon_a + \varepsilon_b)\phi_a(\mathbf{r}_1)\phi_b(\mathbf{r}_2) \end{aligned}$$

つまり、この積は相互作用のない場合の固有値問題の解であることがわかる。

ところでいま考えた積の代わりに、別の積、 $\phi_b(\mathbf{r}_1)\phi_a(\mathbf{r}_2)$ 、を考えると、これも同じように固有状態であり、同じエネルギーをもつことがわかる。つまり、これら2つの状態は互いにエネルギー的に縮退していることがわかる。一般に  $n$  粒子を含む系について、 $n$  個の異なる状態を用いて  $n!$  通りの異なる積からなる多体系の波動関数を定義することができるが、これらはすべてエネルギー的に縮退していることがわかる。

いま述べたエネルギー準位の縮退は、系の対称性に起因するものである。系に同じ粒子が含まれるということは、それらの粒子の入れ替えに対し系が不変に保たれることを意味する。例えば、2つの粒子を含むハミルトニアン  $H(\xi_1, \xi_2)$  に対し、2つの粒子を入れ替える操作  $P_{12}$  を次のように定義しよう。

$$P_{12}\phi(\xi_1, \xi_2) = \phi(\xi_2, \xi_1)$$

ハミルトニアンはこの変換に対して不変であると考えられる。

$$P_{12}H(\xi_1, \xi_2)P_{12}^{-1} = H(\xi_2, \xi_1) = H(\xi_1, \xi_2) \quad (62)$$

エネルギー準位の縮重(交換縮重と呼ぶ)は、この粒子の入れ替えについての対称性によるもので、相互作用があるかどうかには関係がなく存在する。

## 5.2 粒子の同等性とパウリの排他律

量子力学の対象となる粒子または、複数の粒子からなる複合粒子は、同じ種類の粒子の場合には互いに区別がつかないという性質がある。これを粒子の同等性と呼んでいる。粒子同士が全く区別がつかないことを数学的に表現すると、任意の粒子対  $i, j$  の入れ替え操作に対してハミルトニアンが(62)と同じような不変性を示すということになる。ただし、粒子の入れ替えについては、粒子を記述する変数のすべてについて行う必要がある。例えば、粒子が座標以外にスピン変数のような内部自由度を有する場合は、それらも含めてすべて入れ替えを行うこととする。

対称性についての説明でも述べたように、何らかの対称性をもつ系の取り扱いには、その対称操作についての固有状態として分類するのが便利である。また、系のもつ対称性は時間が経過しても保存される。例えば2つの粒子を含む系の状態を対称性にしたがって分類すると次のようになる。まず、固有値問題を考えてみよう。系を記述する波動関数が  $\phi(\xi_1, \xi_2)$  で与えられるとしたとき、粒子の同等性は、粒子の入れ替えによって得られる関数も同じ状態を表すことを意味する。したがって次の関係が成り立つ。

$$P_{12}\phi(\xi_1, \xi_2) = \phi(\xi_2, \xi_1) = e^{i\theta}\phi(\xi_1, \xi_2)$$

つまり入れ替え前後の波動関数は位相因子( $\theta$ は適当な位相)に違いがあるだけである。入れ替えの操作を2回続けて作用させると元に戻るので、 $P_{12}^2 = 1$ が成り立つことから、固有値として次のように  $e^{i\theta} = \pm 1$ の値が得られる。

$$P_{12}^2\phi(\xi_1, \xi_2) = e^{2i\theta}\phi(\xi_1, \xi_2) = \phi(\xi_1, \xi_2), \quad e^{2i\theta} = 1$$

例えば 2 つの粒子の場合に 2 つの 1 変数関数の積で表される状態を考えた場合、入れ替え操作  $P_{12}$  についての固有関数は次のように表される。

$$\begin{aligned}\phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_a(\xi_1)\phi_b(\xi_2) + \phi_b(\xi_1)\phi_a(\xi_2)] \\ \phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_a(\xi_1)\phi_b(\xi_2) - \phi_b(\xi_1)\phi_a(\xi_2)]\end{aligned}$$

上の関数  $\phi_S$  は、入れ替えに対して  $+1$  の固有値をもつ対称な関数で、もう一方は固有値が  $-1$  に対応する反対称な関数である。

3 個以上の粒子を含む系の対称性は、より複雑な可能性が現れる。ここで重要なことは、量子力学の状態として許されるのはそのうちの完全対称と完全反対称に対応するものに限られるということである。完全対称、反対称というのは、任意の粒子対の入れ替えに対して状態が符号をかえるかどうかで定義される。任意の粒子対の入れ替えに対し、符号を変えない状態が完全対称、マイナスの符号が現れる場合が完全反対称の状態である。異なる  $n$  個の 1 変数の関数の積から  $n!$  の異なる状態を定義し、それらを対称性に依じて分類することができるが、量子力学的に許されるのはその中のたった 1 個の状態に限られるということである。系がどの対称をもつかは、含まれる粒子のよってあらかじめ決まっている。それぞれの対称性にしたがう粒子を総称して、ボース粒子、フェルミ粒子と呼ぶ。粒子のもつスピンと対称性との関係、粒子の例を表 3 に示す。

	スピン	置換操作の固有値	例
フェルミ粒子 (Fermion)	半整数	$-1$	電子、陽子、中性子、 $\text{He}^3$
ボース粒子 (Boson)	整数	$1$	光子、 $\text{He}^4$

表 3: フェルミ粒子とボース粒子

### 5.3 完全対称、または完全反対称の波動関数の構成

ここでは、 $n$  個の粒子の座標に関する任意の関数から、量子力学の波動関数として要求される完全対称、および完全反対称の波動関数を作るための一般的な方法について説明する。

#### 5.3.1 完全対称の波動関数

まず最初に任意の  $n$  変数の関数  $f(\xi_1, \dots, \xi_n)$  から完全対称な関数を作る方法を説明する。ただし、関数に含まれる粒子の座標  $\xi_i$  は、必要に応じて座標以外にスピンなどの内部自由度も含むものとする。例えば、粒子がスピンの自由度を有する場合には、 $(\mathbf{r}_i, \sigma)$  を表すものとする。

便宜的に粒子に 1 から  $n$  までの番号を割り当てたとき、いろいろな粒子の入れ替えは、数字の列  $(1, 2, 3, \dots, n)$  をいろいろなやり方  $(i_1, i_2, i_3, \dots, i_n)$  で並べ替えることに対応する。並べ方の総数は  $n!$  通りある。これが変数の並べ方  $(\xi_1, \dots, \xi_n)$  を、別な並べ方  $(\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_n})$  に置き換えることに対応する。そこで、1 から  $n$  までの自然数の  $k$  のそれ

それを自然数  $i_k$  に置き換えることによる新たな並べ方に変換するための  $n!$  個の演算子  $P_{\{i_k\}} = P_{\{i_1, i_2, \dots\}}$  を導入しよう。定義から次の式が成り立つ。

$$P_{\{i_k\}}(1, 2, 3, \dots, n) = (i_1, i_2, i_3, \dots, i_n)$$

例えば、3 個の粒子の場合は以下ようになる。

$$P_{\{231\}}(1, 2, 3) = (2, 3, 1) = P_{12}P_{23}(1, 2, 3)$$

この例のようにどんな並べ方の操作  $P_{\{i_k\}}$  も 2 つの数の入れ替えの積の形として表すことができる。つまり、 $P_{\{231\}} = P_{12}P_{23}$  が成り立つ。

ここで、座標のすべての並べ方についての演算子の和を作用して得られる次の関数を考えてみよう。

$$f_S(\xi_1, \dots, \xi_n) = \sum_{\{i_k\}} P_{\{i_k\}} f(\xi_1, \dots, \xi_n) \quad (63)$$

このようにして得られる関数は任意の粒子対の座標の入れ換えに対して対称であることがわかる。例えばこの関数に対し、座標  $k_i, k_j$  を用いて表される 2 個の粒子の入れ替えを行った場合を考えてみよう。上の関数の右辺の和には、粒子についてのすべての異なる並べ方に対応する関数が含まれている。その和に含まれる関数  $f(\dots, \xi_{k_i}, \dots, \xi_{k_j}, \dots)$  に対し、座標  $k_i, k_j$  を入れ替えた関数  $f(\dots, \xi_{k_j}, \dots, \xi_{k_i}, \dots)$  も必ず含まれている。この  $\dots$  には、対象となる 2 粒子を除く他の粒子について、全く同じに並べた座標が入るものとする。粒子の座標の入れ換えに対し、これら 2 つの関数が単に入れ替わるだけであるため、操作を行っても関数の和全体には何の影響も現れない。つまり、 $f_S$  は完全反対称な関数であることがわかる。具体的に 3 個の座標をもつ関数に (63) の操作によって得られる対称化された関数の和は次のように表される。

$$\begin{aligned} f_S(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = & f(\xi_1, \xi_2, \xi_3) + f(\xi_2, \xi_3, \xi_1) + f(\xi_3, \xi_1, \xi_2) \\ & + f(\xi_2, \xi_1, \xi_3) + f(\xi_1, \xi_3, \xi_2) + f(\xi_3, \xi_2, \xi_1) \end{aligned}$$

変数の対  $\xi_1$  と  $\xi_2$  との入れ替えを行ったとき、右辺の第 1 行の関数が、対応する 2 行目の関数と入れ替わることがわかる。ボース粒子系を記述するための状態は、必ずこのように完全対称化された関数を用いなければならない。