物性物理学（前期担当分）

電子相関　電子間相互作用　物性　多数の電子

量子力学 → 多粒子系の量子力学

第二量子化　2nd Quantization

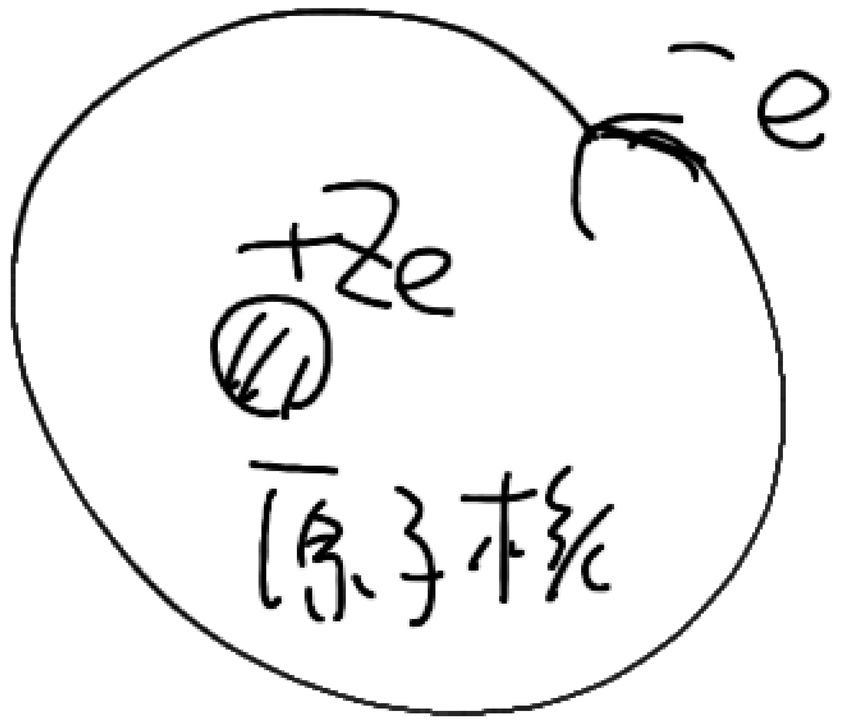
量子力学の復習 →

量子力学の復習

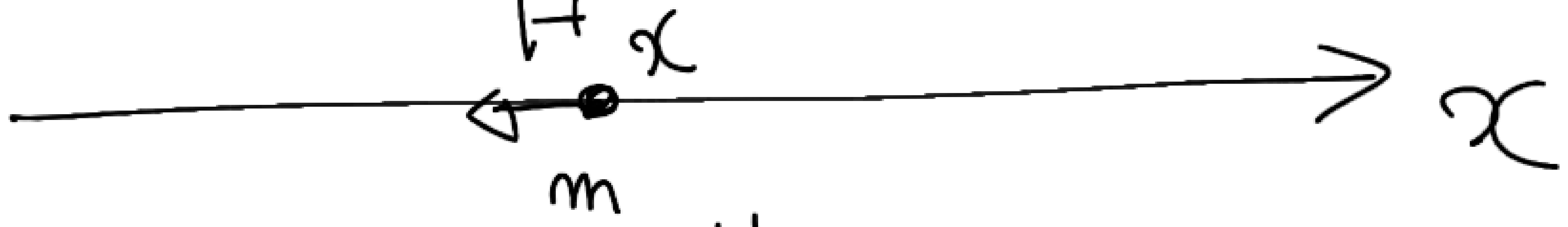
古典論

一粒子系 ポテンシャル問題

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} V \quad , \text{force}$$



1次元 $\quad F = -\partial_x V \qquad V(x)$



運動方程式 $\quad m\ddot{x} = -\partial_x V$

$$m\dot{x} = mv = p \qquad \begin{cases} \dot{p} = -\partial_x V \\ \dot{x} = \frac{1}{m} p \end{cases}$$

ハミルトニアン形式（正準方程式）

$$H = \frac{p^2}{2m} + V \qquad \left.\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial x} = -\partial_x V \end{aligned}\right\}$$

$H = \frac{p^2}{2m} + V \rightarrow p = -i\hbar\partial_x$, $[x, p] = i\hbar$

$[x,p] = xp - px$

量子化

~~第一量子化~~

シュレディンガー方程式 $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$

定常状態 H：t (時間) に依存しない

$\psi(x,t) = \psi(x)e^{-i\omega t}$

$\hbar\omega\psi(x)e^{-i\omega t} = e^{-i\omega t}H\psi(x)$

$\boxed{H\psi = E\psi,}$ $E = \hbar\omega$

固有値問題

質点 1の場合 $\psi(x)$

質点の座標 (1つ) に依存

→ 多数の粒子ではどうなるか？

多粒子系の古典力学

N粒子系（質点がN個）　同じ質点がN個：（同種粒子系）

i番目の質点の座標を $\vec{r}_i$, $i = 1, 2, 3, \cdots, N$

運動方程式（Newton）

$$m\ddot{\vec{r}}_i = \vec{F}_i$$

$\vec{F}_i$: ポテンシャル力　$\vec{F}_i = -\vec{\nabla}_i V = -\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_i} \\ \frac{\partial}{\partial y_i} \\ \partial z_i \end{pmatrix} V$

V : ポテンシャル（エネルギー）

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \cdots, \vec{r}_N)$$

$$m\ddot{\vec{r}}_i = -\vec{\nabla}_i V$$　x, y, z 3成分　$\alpha = x, y, z$

$$m\ddot{r}_{i,\alpha} = -\partial_{i,\alpha} V$$　(i, α) 3N個 自由度

$$H = K + V$$

$$K = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} \qquad \vec{p}_i = m\dot{\vec{r}}_i = m\vec{v}_i \ , \ \vec{v} = \dot{\vec{r}}_i$$

正準方程式

$$\left.\begin{aligned} \dot{r}_{i,\alpha} &= \frac{\partial H}{\partial p_{i,\alpha}} \\ \dot{p}_{i,\alpha} &= -\frac{\partial H}{\partial r_{i,\alpha}} \end{aligned}\right\} \Longleftrightarrow \text{Newton eq.}$$

V ? 1体力, 2体力, 3体力 ...

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N) = \overbrace{\sum_{i} V_1(\vec{r}_i)}^{1体力} + \underbrace{\overbrace{\frac{1}{2!}\sum_{i \neq j} V_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j)}^{2体力} + \frac{1}{3!}\sum_{i \neq j \neq k} V_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) + \cdots}_{相互作用\ (\text{interaction})}$$

電子相関

クーロン力 $\dfrac{e_1 e_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$

相互作用 (interaction)

多粒子系の量子力学 (相互作用のない場合)

第一量子化

$V_2=0,\ V_3=0,\ \cdots$

$$V(\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N)=\sum_{i=1}^{N} V_1(\vec{r}_i)$$

$$H=\sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{2m}+\sum_{i=1}^{N} V_1(\vec{r}_i)$$

$$=\underbrace{\sum_{i=1}^{N} h(\vec{r}_i)}\ ,\quad h(\vec{r})=\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}+V_1(\vec{r})$$

: i に依存しない共通の形

多粒子系 $\Longleftrightarrow$ 一粒子系

$$h(\vec{r})\,\phi_k(\vec{r})=\varepsilon_k\,\phi_k(\vec{r})\qquad k=1,2,3,\cdots \text{ 固有状態の名前}$$

一粒子問題

$$H(\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N)\,\Psi(\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N)=E\,\Psi(\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N)$$

: N粒子系の量子力学

変数分離型 $\Psi_{(k_1,\cdots,k_N)}(\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N)=\phi_{k_1}(\vec{r}_1)\,\phi_{k_2}(\vec{r}_2)\cdots\phi_{k_N}(\vec{r}_N)$

$$H\Psi_{(k_1\cdots k_N)}(\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N) = E_{(k_1,\cdots,k_N)}\Psi_{(k_1\cdots k_N)}$$

$$\left(h(\vec{r}_1)+h(\vec{r}_2)+\cdots\right)\phi_{k_1}(r_1)\,\phi_{k_2}(r_2)\cdots$$

$$= \Big\{\underbrace{h(\vec{r}_1)\phi_{k_1}(\vec{r}_1)}_{=\varepsilon_{k_1}\phi_{k_1}(r_1)}\Big\}\phi_{k_2}(r_2)\cdots\cdots$$

$$+\ \phi_{k_1}(\vec{r}_1)\Big\{h(\vec{r}_2)\underbrace{\phi_{k_2}(r_2)}_{\varepsilon_{k_2}\phi_{k_2}(r_2)}\Big\}\phi_{k_3}(r_3)\cdots\cdots + \cdots$$

$$= \underbrace{\left(\varepsilon_{k_1}+\varepsilon_{k_2}+\cdots+\varepsilon_{k_N}\right)}_{=E_{(k_1\cdots k_N)}}\underbrace{\phi_{k_1}(\vec{r}_1)\,\phi_{k_2}(\vec{r}_2)\cdots\phi_{k_N}(\vec{r}_N)}_{\Psi_{(k_1\cdots k_N)}}$$

粒子の入れかえに関する対称性　P_{ij} : $\vec{r}_i$ と $\vec{r}_j$ を入れかえる！

同種粒子系　$\Psi(\vec{r}_1, \cdots \vec{r}_i \cdots \vec{r}_j \cdots, \vec{r}_N)$

P_{ij}　$H = \sum_{i=1}^{N} h(r_i)$

Hは P_{ij} による入れかえで不変！

$$P_{ij} H P_{ij}^{-1} = H$$

$$H\Psi = E\Psi$$

$$\underbrace{P_{ij} H P_{ij}^{-1}}_{H} P_{ij}\Psi = E P_{ij}\Psi$$

Ψ が固有値Eの解なら

$P_{ij}\Psi$ も固有値Eの解となる //

$[H, P_{ij}] = 0$　交換可能である

$\Rightarrow$ H と P_{ij} は同時対角化可能

$H\Psi = E\Psi$

$P_{ij}\Psi = p_{ij}\Psi$ 　 $P_{ij}^2 = 1$ 　 $P_{ij}^2 = 1 \to p_{ij} = \begin{cases} +1 & \text{Boson ボーズ粒子系} \\ -1 & \text{Fermion フェルミ粒子系} \end{cases}$

単位演算子

電子はフェルミ粒子

k₁‥k_Nの順序に依存

$P_{ij}\Psi = -\Psi$

$\Psi_{(k_1\cdots k_N)} = \phi_{k_1}(\vec{r}_1)\cdots\phi_{k_i}(r_i)\cdots\phi_{k_j}(r_j)\cdots$

$P_{ij}\Psi_{(k_1\cdots k_N)} = \cdots\ \phi_{k_i}(r_j)\ \phi_{k_i}(r_i)$

比例しない

ではどうするか？

$E_{(k_1\cdots k_N)} = \sum_{j=1}^{N} \varepsilon_{k_j}$ 　 $i \Leftrightarrow j$で不変 → 縮退した

波動関数を多

$$\Psi^{F}(\vec{r}_1, \cdots, \vec{r}_N) = C_F \sum_{P} (-)^P \phi_{k_{P1}}(\vec{r}_1)\, \phi_{k_{P2}}(\vec{r}_2)\, \phi_{k_{P3}}(\vec{r}_3) \cdots \phi_{k_{PN}}(\vec{r}_N)$$

行列式の定義

$P : (1, 2, 3, \cdots)$ 置換

$(P1, P2, P3, \cdots)$

例

	1	2	3	4	$\cdots$	
P	1	2	3	4		$(-)^P = 1$
P'	2	1	3	4		$(-)^{P'} = -1$
$\vdots$						

P : $N!$ 通り)

置換の符号

$$= C_F \det D \quad \text{Slater行列式}$$

$$D = \begin{pmatrix} \phi_{k_1}(\vec{r}_1) & \phi_{k_1}(\vec{r}_2) & \phi_{k_1}(\vec{r}_3) & \cdots & \phi_{k_1}(\vec{r}_N) \\ \phi_{k_2}(\vec{r}_1) & \phi_{k_2}(r_2) & \phi_{k_2}(r_3) & \cdots & \phi_{k_2}(\vec{r}_N) \\ \vdots & & & \ddots & \\ \phi_{k_N}(\vec{r}_1) & \cdots & & & \phi_{k_N}(\vec{r}_N) \end{pmatrix}$$

$$\Psi^F_{\{k_1,\cdots,k_N\}}(\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N) = C_F \det D_{\{k_1,\cdots,k_N\}}$$

$$P_{ij}\Psi^F_{\{\}} = -\Psi^F_{\{\}}$$

$$H\Psi^F_{\{\}} = E_{\{\}}\Psi_{\{\}}$$

$$E_{\{k_1,\cdots,k_N\}} = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_{k_i}$$

フェルミ粒子系の多粒子波動関数

占有数表示へ

$$D(\{\phi_{k_i}(r_j)\})$$

$$\Psi_{\{k_1,\cdots,k_N\}} = C_{N} \det D$$

$$E_{\{k_1,\cdots k_N\}} = \sum_{j=1}^{N} \varepsilon_{k_j} \qquad h\phi_k = \varepsilon_k \phi_k$$

// ↑ N個の粒子が占有している状態を指定

占有数表示

占有数 (occupation number)

$$n_k = \begin{cases} 0 & \text{状態}k\text{が非占有の時} \\ 1 & \text{〃　　占有されている場合.} \end{cases}$$

kはすべての1粒子状態に関して定義

$$\sum_{j=1}^{N} \varepsilon_{k_j} = \sum_{k} \varepsilon_k n_k = E_{\{n_k\}}$$

$$H\Psi_{\{n_k\}} = E_{\{n_k\}}\Psi_{\{n_k\}}$$