《高等量子力学》第 21 讲

第七章 二次量子化

以上处理全同粒子体系的方法是先求解 Schroedinger 方程，确定哪个粒子处于哪个单粒子态，再将态对称化。这种方法有下列不足：1）既然是全同粒子，没必要预先确定哪个粒子处于哪个态，只需要某个态上有几个粒子的信息；2）粒子数N较大时，对称化会变得非常麻烦；3）不能处理粒子间的转化，即不能过渡到相对论量子多体系统。

1. 粒子数表象

1) *Fock* 空间

设单粒子力学量 $\hat{A}$ 的本征值和本征态

本征值： $a_1,\ a_2, \ldots\ldots$

本征态： $|a_1\rangle,\ |a_2\rangle, \ldots\ldots$

由全同性原理，我们不知道全同粒子体系中哪个粒子处于哪个本征态，只关心有几个粒子处于某个本征态。所以**用单粒子态上的粒子数分布来描述全同粒子体系的状态：**

$$|n_1, n_2, \ldots\ldots\rangle$$

n_i 是处于单粒子态 $|a_i\rangle$ 的粒子数。由 $|n_1, n_2, \ldots\ldots\rangle$ 构成的矢量空间称为 *Fock* 空间。显然，态 $|n_1, n_2, \ldots\ldots\rangle$ 是自动满足交换对称性的。

真空态和单粒子态可以写成

$$|0\rangle = |0, 0, \ldots\ldots\rangle, \qquad |a_i\rangle = |0, 0, \ldots n_i = 1, \ldots\rangle。$$

2) 产生与消灭算符

既然多粒子态用粒子数分布表示，则作用在态上的算符就是改变粒子数分

布的单粒子产生与消灭算符 $\hat{a}_i$ 和 $\hat{a}_i^+$。定义

$$\hat{a}_i^+ \left| n_1, \ldots, n_i, \ldots \right\rangle \sim \left| n_1, \ldots, n_i + 1, \ldots \right\rangle,$$
$$\hat{a}_i \left| n_1, \ldots, n_i, \ldots \right\rangle \sim \left| n_1, \ldots, n_i - 1, \ldots \right\rangle,$$

显然，对于真空态，

$$\hat{a}_i \left| 0 \right\rangle = \hat{a}_i \left| 0, 0, \ldots, 0, \ldots \right\rangle = 0, \qquad \hat{a}_i^+ \left| 0 \right\rangle = \hat{a}_i^+ \left| 0, 0, \ldots, 0, \ldots \right\rangle = \left| a_i \right\rangle$$

对于单粒子态，

$$\hat{a}_i \left| a_j \right\rangle = \hat{a}_i \left| 0, 0, \ldots n_j = 1, \ldots \right\rangle = \delta_{ij} \left| 0 \right\rangle。$$

3) 表象变换

全同粒子体系的态既可以按单粒子力学量 $\hat{A}$ 的本状态的粒子数分布来表示，也可以按单粒子力学量 $\hat{B}$ 的本状态的粒子数分布来表示：

单粒子本征值与本状态	a_i , $\left| a_i \right\rangle$	b_i , $\left| b_i \right\rangle$
Fock 空间	$\left| n_1, n_2, \ldots\ldots \right\rangle$	$\left| \tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \ldots\ldots \right\rangle$
消灭与产生算符	$\hat{a}_i$, $\hat{a}_i^+$	$\hat{b}_i$, $\hat{b}_i^+$

单粒子本征态的表象变换

$$\left| a_i \right\rangle = \sum_j \left| b_j \right\rangle \left\langle b_j \middle| a_i \right\rangle = \sum_j S_{ji} \left| b_j \right\rangle, \qquad S_{ji} = \left\langle b_j \middle| a_i \right\rangle$$

由表象变换矩阵 S 的幺正性 $\left(S^+ S \right)_{ij} = \left(S S^+ \right)_{ij} = \delta_{ij}$，单粒子算符的表象变换

$$\hat{a}_i \left| a_j \right\rangle = \delta_{ij} \left| 0 \right\rangle = \sum_k S_{ik}^+ S_{kj} \left| 0 \right\rangle = \sum_{k,l} S_{ik}^+ S_{lj} \delta_{kl} \left| 0 \right\rangle$$
$$= \sum_{k,l} S_{ik}^+ S_{lj} \hat{b}_k \left| b_l \right\rangle = \sum_k S_{ik}^+ \hat{b}_k \left(\sum_l S_{lj} \left| b_l \right\rangle \right) = \sum_k S_{ik}^+ \hat{b}_k \left| a_j \right\rangle$$

故

$$\hat{a}_i = \sum_k S_{ik}^{+} \hat{b}_k, \qquad \hat{a}_i^{+} = \sum_k \hat{b}_k^{+} S_{ki} \text{。}$$

4) 产生与消灭算符之间的对易关系

考虑**不同单粒子态的消灭与产生算符的对易关系**（注意：谐振子中的消灭与产生算符是作用到同一单粒子态的）。

A. 产生算符之间（消灭算符之间）的对易关系

对于任意多粒子态$|\psi\rangle$，$\hat{a}_i^{+}\hat{a}_j^{+}|\psi\rangle$与$\hat{a}_j^{+}\hat{a}_i^{+}|\psi\rangle$是同一状态，只差一个常数，

$$\hat{a}_i^{+}\hat{a}_j^{+}|\psi\rangle = \lambda \hat{a}_j^{+}\hat{a}_i^{+}|\psi\rangle,$$
$$\hat{a}_j^{+}\hat{a}_i^{+}|\psi\rangle = \lambda \hat{a}_i^{+}\hat{a}_j^{+}|\psi\rangle,$$

由于$|\psi\rangle$的任意性，有

$$\hat{a}_i^{+}\hat{a}_j^{+} - \lambda \hat{a}_j^{+}\hat{a}_i^{+} = 0,$$
$$\hat{a}_j^{+}\hat{a}_i^{+} - \lambda \hat{a}_i^{+}\hat{a}_j^{+} = 0,$$

由于

$$\hat{a}_i^{+}\hat{a}_j^{+} - \lambda(\lambda \hat{a}_i^{+}\hat{a}_j^{+}) = 0, \qquad \left(1-\lambda^2\right)\hat{a}_i^{+}\hat{a}_j^{+} = 0, \qquad \lambda = \pm 1$$

故有

$$\hat{a}_i^{+}\hat{a}_j^{+} - \hat{a}_j^{+}\hat{a}_i^{+} = 0,$$
$$\hat{a}_i\hat{a}_j - \hat{a}_j\hat{a}_i = 0,$$

或

$$\hat{a}_i^{+}\hat{a}_j^{+} + \hat{a}_j^{+}\hat{a}_i^{+} = 0,$$
$$\hat{a}_i\hat{a}_j + \hat{a}_j\hat{a}_i = 0.$$

B. 产生与消灭算符之间的对易关系

当$i \neq j$时，$\hat{a}_i \hat{a}_j^+ |\psi\rangle$与$\hat{a}_j^+ \hat{a}_i |\psi\rangle$是同一个态（注意：$i = j$时两者有可能不同），

$$\left(\hat{a}_i \hat{a}_j^+ - \mu \hat{a}_j^+ \hat{a}_i\right)|\psi\rangle = 0,$$

即

$$\hat{a}_i \hat{a}_j^+ - \mu \hat{a}_j^+ \hat{a}_i = 0 \quad 。$$

由表象变换

$$\hat{a}_i \hat{a}_j^+ - \mu \hat{a}_j^+ \hat{a}_i = \sum_{k,l} S_{ik}^+ S_{lj} \left(\hat{b}_k \hat{b}_l^+ - \mu \hat{b}_l^+ \hat{b}_k\right) 。$$

因为

$$\hat{b}_k \hat{b}_l^+ - \mu \hat{b}_l^+ \hat{b}_k = 0 \quad (k \neq l),$$

有

$$\hat{a}_i \hat{a}_j^+ - \mu \hat{a}_j^+ \hat{a}_i = \sum_{k} S_{ik}^+ S_{kj} \left(\hat{b}_k \hat{b}_k^+ - \mu \hat{b}_k^+ \hat{b}_k\right) 。$$

只有当

$$\hat{b}_k \hat{b}_k^+ - \mu \hat{b}_k^+ \hat{b}_k = \hat{A}$$

是一与k无关的算符，才能保证

$$\hat{a}_i \hat{a}_j^+ - \mu \hat{a}_j^+ \hat{a}_i = \hat{A} \sum_{k} S_{ik}^+ S_{kj} = \delta_{ij} \hat{A} = 0 \qquad \left(i \neq j\right) 。$$

结合

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^+ - \mu \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = \hat{A} \qquad (i = j)$$

有

$$\hat{a}_i \hat{a}_j^+ - \mu \hat{a}_j^+ \hat{a}_i = \hat{A} \delta_{ij} 。$$

C. 确定 μ 与 $\hat{A}$

产生与消灭算符 $\hat{a}_i^+,\hat{a}_i$ 不是厄米算符，只有它们的组合 $\hat{a}_i\hat{a}_i^+$，$\hat{a}_i^+\hat{a}_i$ 是厄米算符。考虑到

$$
\sum_i \hat{a}_i\hat{a}_i^+ = \sum_{i,k,l} S_{ik}^+ S_{li}\hat{b}_k\hat{b}_l^+ = \sum_{k,l}\delta_{kl}\hat{b}_k\hat{b}_l^+ = \sum_i \hat{b}_i\hat{b}_i^+,
$$
$$
\sum_i \hat{a}_i^+\hat{a}_i = \sum_i \hat{b}_i^+\hat{b}_i
$$

与表象无关，那么与表象无关的总粒子数算符可以写成

$$
\hat{N} = x\sum_i \hat{a}_i^+\hat{a}_i + y\sum_i \hat{a}_i\hat{a}_i^+ + \sum_i z = \sum_i \hat{n}_i,
$$
$$
\hat{n}_i = x\hat{a}_i^+\hat{a}_i + y\hat{a}_i\hat{a}_i^+ + z,
$$

其中 $\hat{n}_i$ 是作用于态 $|a_i\rangle$ 上的粒子数算符，x, y, z 均为常数。由于

$$
\hat{n}_i|0\rangle = 0, \qquad x\hat{a}_i^+\hat{a}_i|0\rangle + y\hat{a}_i\hat{a}_i^+|0\rangle + z|0\rangle = 0,
$$

考虑到

$$
\hat{a}_i|0\rangle = 0, \quad \hat{a}_i\hat{a}_i^+|0\rangle = \hat{a}_i|a_i\rangle = |0\rangle
$$
$$
(y+z)|0\rangle = 0, \quad z = -y
$$
$$
\hat{n}_i = x\hat{a}_i^+\hat{a}_i + y(\hat{a}_i\hat{a}_i^+ - 1)
$$
。

先在 $i \neq j$ 时确定 $\hat{a}_i\hat{a}_j^+ - \mu\hat{a}_j^+\hat{a}_i = 0$ 中的 μ。由

$$
\hat{n}_i\hat{a}_j|\ldots,n_i,\ldots n_j,\ldots\rangle = \hat{n}_i c_j|\ldots,n_i,\ldots n_j-1,\ldots\rangle = c_j n_i|\ldots,n_i,\ldots n_j-1,\ldots\rangle,
$$
$$
\hat{a}_j\hat{n}_i|\ldots,n_i,\ldots n_j,\ldots\rangle = \hat{a}_j n_i|\ldots,n_i,\ldots n_j,\ldots\rangle = n_i c_j|\ldots,n_i,\ldots n_j-1,\ldots\rangle,
$$

有

$$
\hat{n}_i\hat{a}_j - \hat{a}_j\hat{n}_i = 0,
$$
$$
x\left(\hat{a}_i^+\hat{a}_i\hat{a}_j - \hat{a}_j\hat{a}_i^+\hat{a}_i\right) + y\left(\hat{a}_i\hat{a}_i^+\hat{a}_j - \hat{a}_j\hat{a}_i\hat{a}_i^+\right) = 0,
$$

当 $\hat{a}_i\hat{a}_j-\hat{a}_j\hat{a}_i=0$ 时，

$$x\left(\hat{a}_i^+\hat{a}_j-\hat{a}_j\hat{a}_i^+\right)\hat{a}_i+y\hat{a}_i\left(\hat{a}_i^+\hat{a}_j-\hat{a}_j\hat{a}_i^+\right)=0,$$

$$\hat{a}_j\hat{a}_i^+-\hat{a}_i^+\hat{a}_j=0\text{。}$$

同理，当 $\hat{a}_i\hat{a}_j+\hat{a}_j\hat{a}_i=0$ 时，有

$$\hat{a}_j\hat{a}_i^++\hat{a}_i^+\hat{a}_j=0\text{。}$$

故 $i\neq j$ 时，

$$\hat{a}_i\hat{a}_j^+-\mu\hat{a}_j^+\hat{a}_i=0,\qquad \mu=\lambda=\pm1\text{。}$$

现在考虑 $i=j$，此时 $\hat{a}_i\hat{a}_i^+-\mu\hat{a}_i^+\hat{a}_i=\hat{A}$ 中的 μ 已确定，待定 $\hat{A}$。由

$$\left(\hat{a}_i\hat{a}_i^+-\mu\hat{a}_i^+\hat{a}_i\right)|0\rangle=\hat{A}|0\rangle,$$

$$|0\rangle=\hat{A}|0\rangle,\qquad \hat{A}=1\text{。}$$

综合 $i\neq j$ 和 $i=j$ 两种情况，有

$$\hat{a}_i\hat{a}_j^+-\mu\hat{a}_j^+\hat{a}_i=\delta_{ij},\qquad \mu=\pm1\text{。}$$

D. 总结对易关系

有且仅有两套对易关系：

$$\begin{cases}\left[\hat{a}_i,\ \hat{a}_j\right]=0\\ \left[\hat{a}_i^+,\ \hat{a}_j^+\right]=0\\ \left[\hat{a}_i,\ \hat{a}_j^+\right]=\delta_{ij}\end{cases},\qquad \begin{cases}\left\{\hat{a}_i,\ \hat{a}_j\right\}=0\\ \left\{\hat{a}_i^+,\ \hat{a}_j^+\right\}=0\\ \left\{\hat{a}_i,\ \hat{a}_j^+\right\}=\delta_{ij}\end{cases},$$

对应两类全同粒子：玻色子和费米子。

5) Pauli 不相容原理

对于费米子系统，

$$
\begin{aligned}
&\hat{a}_i^+\hat{a}_i^+ = 0, \\
&\hat{a}_i^+\hat{a}_i^+|0\rangle = 0, \\
&\hat{a}_i^+|0,\dots,n_i = 1,\dots\rangle = 0, \\
&|0,\dots,n_i = 2,\dots\rangle = 0,
\end{aligned}
$$

说明不可能有两个或两个以上的费米子占据同一个单粒子态。对于费米子，$n_i = 0,1$。

6) 粒子数算符

$$\hat{n}_i = x\hat{a}_i^+\hat{a}_i + y(\hat{a}_i\hat{a}_i^+ - 1)\,,$$

因为

$$\hat{a}_i\hat{a}_i^+ = 1 \pm \hat{a}_i^+\hat{a}_i\,,$$

故

$$\hat{n}_i = (x \pm y)\hat{a}_i^+\hat{a}_i\,。$$

因为

$$
\begin{aligned}
&\hat{n}_i|a_i\rangle = |a_i\rangle, \\
&(x \pm y)\hat{a}_i^+\hat{a}_i|a_i\rangle = (x \pm y)\hat{a}_i^+|0\rangle = (x \pm y)|a_i\rangle = |a_i\rangle,
\end{aligned}
$$

故

$$
\begin{aligned}
&x \pm y = 1, \\
&\hat{n}_i = \hat{a}_i^+\hat{a}_i\,。
\end{aligned}
$$