

# 导出二次量子化表象的简单代数方法

李伯斌 吴建华

中国科学院物理研究所, 北京 100080

1991 年 7 月 8 日收到

本文采用纯粹的代数运算, 导出了全同粒子系统的二次量子化表象, 与传统的导出方法相比, 我们的方法具有简单、初等和能够清楚地表述所涉及的物理量之涵义的优点。

PACC: 0365;0530;0200

## 一、引 言

在量子力学、量子统计理论及凝聚态量子理论中, 二次量子化表象具有基础的重要性。这种表象首先是由 Dirac<sup>[1]</sup> 针对玻色子系统引入的, 接着经过 Jordan, Klein 和 Wigner 等人<sup>[2,3]</sup> 的发展并推广到费密子系统。在这些工作的基础上, Fock<sup>[4]</sup> 统一了两种系统的二次量子化表象的导出方法, 而 Fock 的方法又得到 Боголюбов<sup>[5]</sup> 的进一步完善。虽然还有其他的形式而抽象的导出方法, 但在验证它们的正确性时又回到 Fock 方法上去。因此, 迄今的有关著作(例如文献[6—9])在讲述二次量子化表象时, 几乎都采用 Fock-Bogolubov 方法(以下简称 FB 方法)。

FB 方法的主要步骤是: 首先, 在坐标表象中用单粒子波函数的正交归一基, 构造出满足粒子坐标置换对称性或反对称性的多粒子波函数的正交归一基, 它们可用单粒子态的占据数(有时也称为粒子数)来标识。接着, 求多粒子系统的力学量在这些对称或反对称基中的矩阵元, 它们含有关于粒子数的 Kronecker 符号的因子。最后引入产生和湮没算符以取代上述 Kronecker 符号, 从而将力学量表示成产生和湮没算符的多项式。

上述传统方法的思路是很清楚的, 但其中求用粒子数表达的力学量矩阵元这一步却十分繁琐, 而且容易使粒子数表象的基函数, 从而使产生和湮没算符的涵义变得模糊。因此有人<sup>[10]</sup>认为: “These tend to leave the reader more confused than convinced.”

虽然二次量子化表象已有约 50 年的历史, 但鉴于其重要性及其应用的广泛性, 则发展一种更为简捷的导出方法, 似仍然不乏现实意义。本文是在这方面的一个尝试。与传统方法相比, 我们所采用的代数方法, 既简单又初等, 且能把此表象中的波函数及力学量(算符)的数学构造阐释得十分透彻。

## 二、在普通表象理论中引入 $t$ 算符和 $\tau$ 算符

首先考虑单粒子系统。

以  $x$  记粒子的坐标(广义的),则  $x$  表象的波函数是以  $x$  为宗量的复值函数,其全体构成 Hilbert 空间  $\mathcal{Q}_1^{(x)}$ , 其中的内积以  $(\cdot, \cdot)$  表示之。设  $\varphi_1(x), \dots, \varphi_\lambda(x)$  是  $\mathcal{Q}_1^{(x)}$  的一组正交归一基:

$$\mathcal{Q}_1^{(x)} = \text{span}\{\varphi_i(x): i = 1, 2, \dots, \lambda\}, \quad (\varphi_i(x), \varphi_j(x)) = \delta_{ij}. \quad (1)$$

此处  $\lambda$  一般为  $\infty$ , 在近似处理中亦可是有限的正整数。若

$$\varphi(x) = \sum_{i=1}^{\lambda} a_i \varphi_i(x) \in \mathcal{Q}_1^{(x)},$$

则复数组(或列矢量)  $(a_i: i = 1, \dots, \lambda) \equiv (a_i) \equiv |\psi\rangle$  称为  $\varphi(x)$  的  $\varphi$  表象波函数,其全体记为  $\mathcal{Q}_1^{(\varphi)}$ 。在  $\mathcal{Q}_1^{(\varphi)}$  中按寻常做法引入线性运算及内积而成为 Hilbert 空间,以  $(\cdot | \cdot)$  记

内积,即当  $|\psi\rangle = (a_i)$  和  $|\varphi\rangle = (b_i)$  时,  $(\varphi | \psi) = \sum_{i=1}^{\lambda} a_i^* b_i$ 。定义

$$|j\rangle = (\delta_{ij}: i = 1, \dots, \lambda); \quad j = 1, \dots, \lambda. \quad (2)$$

它们构成  $\mathcal{Q}_1^{(\varphi)}$  的正交归一基:

$$\mathcal{Q}_1^{(\varphi)} = \text{span}\{|i\rangle: i = 1, \dots, \lambda\}, \quad (i | j) = \delta_{ij}. \quad (3)$$

这样,  $x$  表象的(线性)算符  $H(x)$ , 在  $\mathcal{Q}_1^{(\varphi)}$  中就表示为数组(或矩阵)

$$(H_{i,j}: i, j = 1, \dots, \lambda) \equiv (H_{i,i}) \equiv H,$$

此处

$$H_{i,i} = (\varphi_i(x), H(x)\varphi_i(x)). \quad (4)$$

$\varphi$  表象算符  $H = (H_{i,i})$  的具体定义是

$$H|k\rangle = \sum_{i=1}^{\lambda} H_{i,k}|i\rangle; \quad k = 1, \dots, \lambda. \quad (5)$$

在  $\mathcal{Q}_1^{(\varphi)}$  中定义算符  $t_{ij} = (\delta_{ki}\delta_{lj}: k, l = 1, \dots, \lambda)$ , 即

$$t_{ij}|k\rangle = \delta_{ik}|j\rangle; \quad k = 1, \dots, \lambda, \quad (6)$$

则有

$$H = \sum_{i=1}^{\lambda} \sum_{j=1}^{\lambda} H_{i,j} t_{ij}. \quad (7)$$

如用矩阵语言,则  $t_{ij}$  是  $(i, j)$  元为 1 而其余元为 0 的矩阵。(6)式有一个很形象的诠释:  $t_{ij}$  将  $|j\rangle$  态转变为  $|i\rangle$  态,而将其它  $|k\rangle$  态湮没,因此可将它们叫做转移-湮没算符,简称  $t$  算符。此外,它就是 Dirac 书<sup>[1]</sup>中的  $|i\rangle\langle j|$ 。

其次考虑由  $N (> 1)$  个粒子构成的系统。

以  $x_i$  记第  $i$  个粒子的坐标,系统的  $x$  表象波函数是多元复值函数  $\psi(x_1, \dots, x_N)$ , 其全体构成 Hilbert 空间  $\mathcal{Q}_N^{(x)}$ 。显然,形如  $\prod_{k=1}^N \varphi_{i_k}(x_k)$  的波函数的全体可取作  $\mathcal{Q}_N^{(x)}$  的正交归一基:

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_N^{(x)} = \text{span}\{\varphi_{i_1}(x_1) \cdots \varphi_{i_N}(x_N): i_k = 1, \dots, \lambda; k = 1, \dots, N\}, \\ (\varphi_{i_1}(x_1) \cdots \varphi_{i_N}(x_N), \varphi_{j_1}(x_1) \cdots \varphi_{j_N}(x_N)) = \prod_{k=1}^N (\varphi_{i_k}(x_k), \varphi_{j_k}(x_k)) = \prod_{k=1}^N \delta_{i_k j_k}. \end{aligned} \quad (8)$$

此处仍以  $(\cdot, \cdot)$  表示  $\mathcal{Q}_N^{(x)}$  中的内积。若

$$\psi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i_1=1}^{\lambda} \cdots \sum_{i_N=1}^{\lambda} a_{i_1 \cdots i_N} \varphi_{i_1}(x_1) \cdots \varphi_{i_N}(x_N) \in \mathcal{Q}_N^{(\varphi)},$$

则数组  $(a_{i_1 \cdots i_N}; i_k = 1, \dots, \lambda; k = 1, \dots, N) \equiv (a_{i_1 \cdots i_N}) \equiv |\psi\rangle$  称为  $\psi(x_1, \dots, x_N)$  的  $\varphi$  表象波函数, 其全体记为  $\mathcal{Q}_N^{(\varphi)}$ , 我们仍如  $\mathcal{Q}_N^{(\varphi)}$  那样把它构造成 Hilbert 空间,

$$|\psi\rangle = (a_{i_1 \cdots i_N}) \text{ 和 } |\varphi\rangle = (b_{i_1 \cdots i_N})$$

的内积为

$$(\psi|\varphi) = \sum_{i_1=1}^{\lambda} \cdots \sum_{i_N=1}^{\lambda} a_{i_1 \cdots i_N}^* b_{i_1 \cdots i_N}.$$

令

$$|j_1 j_2 \cdots j_N\rangle = \left( \prod_{k=1}^N \delta_{i_k j_k}; i_k = 1, \dots, \lambda; k = 1, \dots, N \right), \\ j_l = 1, \dots, \lambda; l = 1, \dots, N. \quad (9)$$

显然它们是  $\mathcal{Q}_N^{(\varphi)}$  中的正交归一基:

$$\mathcal{Q}_N^{(\varphi)} = \text{span}\{|i_1 \cdots i_N\rangle; i_k = 1, \dots, \lambda; k = 1, \dots, N\}, \\ (i_1 \cdots i_N | j_1 \cdots j_N) = \prod_{k=1}^N \delta_{i_k j_k}. \quad (10)$$

像在  $\mathcal{Q}_N^{(\varphi)}$  中那样, 我们在  $\mathcal{Q}_N^{(\varphi)}$  中定义转移-湮没算符或  $\tau$  算符  $\tau_{ij}^{(\alpha)}$  ( $\alpha = 1, \dots, N; i, j = 1, \dots, \lambda$ ):

$$\tau_{ij}^{(\alpha)} | \cdots k_\alpha \cdots \rangle = \delta_{jk_\alpha} | \cdots i \cdots \rangle, \quad (11)$$

即  $|k_1 \cdots k_N\rangle$  经  $\tau_{ij}^{(\alpha)}$  作用后, 或者被湮没(当  $j \neq k_\alpha$  时), 或者使其第  $\alpha$  位上之数由  $j$  变成  $i$  而其余位上之数不变(当  $j = k_\alpha$  时). 这样一来,  $x$  表象的算符  $H(x_1, \dots, x_N)$  在  $\mathcal{Q}_N^{(\varphi)}$  中就被表示成

$$H = \sum_{i_1=1}^{\lambda} \cdots \sum_{i_N=1}^{\lambda} \sum_{j_1=1}^{\lambda} \cdots \sum_{j_N=1}^{\lambda} H_{i_1 \cdots i_N, j_1 \cdots j_N} \tau_{i_1 j_1}^{(1)} \cdots \tau_{i_N j_N}^{(N)},$$

$$H_{i_1 \cdots i_N, j_1 \cdots j_N} = (\varphi_{i_1}(x_1) \cdots \varphi_{i_N}(x_N), H(x_1, \dots, x_N) \varphi_{j_1}(x_1) \cdots \varphi_{j_N}(x_N)). \quad (12)$$

据(11)式, 容易证明  $\tau$  算符具有下列性质:

$$\tau_{ii}^{(\alpha)} \tau_{kl}^{(\alpha)} = \delta_{jk} \tau_{il}^{(\alpha)}, \\ [\tau_{ij}^{(\alpha)}, \tau_{kl}^{(\beta)}] = \delta_{\alpha\beta} (\delta_{jk} \tau_{il}^{(\alpha)} - \delta_{il} \tau_{kj}^{(\alpha)}), \\ \sum_{i=1}^{\lambda} \tau_{ii}^{(\alpha)} = 1. \quad (13)$$

此处  $[a, b] = ab - ba$  为对易子. 为了下面的需要, 我们再定义  $\tau$  算符

$$\tau_{ij}(i, j = 1, \dots, \lambda): \\ \tau_{ij} = \sum_{\alpha=1}^N \tau_{ij}^{(\alpha)}, \quad (14)$$

以及由置换操作  $P$

$$P(1, 2, \dots, N) = (P_1, P_2, \dots, P_N), \quad (15)$$

在  $\mathcal{Q}_N^{(\varphi)}$  中所诱导的算符(仍以  $P$  表示)

$$P|k_1 k_2 \cdots k_N\rangle = |k_{P_1} k_{P_2} \cdots k_{P_N}\rangle, \quad (16)$$

则我们可立即看出：每个  $\tau_{ij}$  算符都具有置换对称性，亦即对上面定义的任一置换算符  $P$ ，有

$$[P, \tau_{ij}] = 0. \quad (17)$$

此外，对于  $\mathcal{Q}^{\mathcal{N}}$  中的基  $|k\rangle = |k_1 \cdots k_N\rangle$ ，令

$$n_i(k) = \sum_{j=1}^N \delta_{ik_j}; \quad i = 1, \cdots, \lambda. \quad (18)$$

$n_i$  是数组  $(k_1, \cdots, k_N)$  中等于  $i$  的数的个数，它们满足条件：

$$0 \leq n_i(k) \leq N; \quad \sum_{i=1}^{\lambda} n_i(k) = N. \quad (19)$$

易见

$$\tau_{ii}|k_1 \cdots k_N\rangle = n_i(k)|k_1 \cdots k_N\rangle; \quad (20)$$

而当  $i \neq j$  时，

$$\tau_{ij}|k_1 \cdots k_N\rangle = \sum_{\alpha=1}^N \delta_{ik_{\alpha}} |k_1 \cdots k_N\rangle_{k_{\alpha} \rightarrow j}, \quad (21)$$

其右端含有  $n_j$  个非零项，每个非零项  $|k_1 \cdots k_N\rangle_{k_{\alpha} \rightarrow j}$  是把  $|k_1 \cdots k_N\rangle$  中的第  $\alpha$  位数  $k_{\alpha}$  ( $\neq j$  时) 换成  $i$  而保持其余位上的数不变所得到的  $\mathcal{Q}^{\mathcal{N}}$  的基。

最后考虑全同粒子系统，但暂不计较波函数的对称性。

代表全同粒子系统真实力学量的算符具有粒子置换对称性；在  $x$  表象中，即是满足  $PH(x_1, x_2, \cdots, x_N)P^{-1} = H(x_{P_1}, x_{P_2}, \cdots, x_{P_N}) = H(x_1, x_2, \cdots, x_N)$ 。它们一般可区分为一次叠加型和  $r$  次叠加型 ( $2 \leq r \leq N$ )，相应的  $x$  表象为

$$H^{(1)}(x_1, \cdots, x_N) = \sum_{\alpha=1}^N A(x_{\alpha}),$$

$$H^{(r)}(x_1, \cdots, x_N) = \frac{1}{r!} \sum'_{\alpha_1, \cdots, \alpha_r} B(x_{\alpha_1}, \cdots, x_{\alpha_r}). \quad (22)$$

式中  $A(\cdot)$  是单粒子算符， $B(\cdots)$  是  $r$  体相互作用算符，它对粒子坐标之置换是对称的。 $\sum'$  代表对满足  $1 \leq \alpha_k \leq N$  且当  $i \neq j$  时  $\alpha_i \neq \alpha_j$  的  $r$  数组  $(\alpha_1, \cdots, \alpha_r)$  求和。将 (22) 式代入 (12) 式并利用 (13) 和 (14) 式，得到  $H^{(1)}(x_1, \cdots, x_N)$  和  $H^{(r)}(x_1, \cdots, x_N)$  的  $\varphi$  表象为

$$H^{(1)} = \sum_{i=1}^{\lambda} \sum_{j=1}^{\lambda} A_{ij} \tau_{ij}, \quad (23)$$

$$H^{(r)} = \frac{1}{r!} \sum_{i_1=1}^{\lambda} \cdots \sum_{i_{r-1}=1}^{\lambda} \sum_{i_r=1}^{\lambda} B_{i_1 \cdots i_r, j_1 \cdots j_r} \tau_{i_1 \cdots i_r, j_1 \cdots j_r}^{(r)}, \quad (24)$$

其中

$$A_{i,j} = (\varphi_i(x), A(x)\varphi_j(x)),$$

$$B_{i_1 \cdots i_r, j_1 \cdots j_r} = (\varphi_{i_1}(x_1) \cdots \varphi_{i_r}(x_r), B(x_1, \cdots, x_r)\varphi_{j_1}(x_1) \cdots \varphi_{j_r}(x_r)), \quad (25)$$

而

$$\tau_{i_1 \cdots i_r, j_1 \cdots j_r}^{(r)} = \sum'_{\alpha_1, \cdots, \alpha_r} \tau_{i_1 \alpha_1}^{(\alpha_1)} \cdots \tau_{i_r \alpha_r}^{(\alpha_r)}. \quad (26)$$

当  $r = 2$  时, 由(13)和(14)式, 易将上式改写成

$$\tau_{i_1 i_2, j_1 j_2}^{(2)} = \tau_{i_1 j_1} \tau_{i_2 j_2} - \delta_{j_1 i_2} \tau_{i_1 j_2}; \quad (27)$$

当  $r > 2$  时, 同样可用  $\tau$  算符来表达  $\tau_{i_1 \dots i_r, j_1 \dots j_r}^{(r)}$ , 但其表达式很繁琐。然而在后面的讨论中,  $r > 2$  情形下的这类表达式不是必需的。要用到的是下列递推公式:

$$\begin{aligned} \tau_{i_1 i_2}^{(1)} &= \tau_{i_1 j_2}, \\ \tau_{i_1 \dots i_r, j_1 \dots j_r}^{(r)} &= \tau_{i_1 \dots i_{r-1}, j_1 \dots j_{r-1}} \tau_{i_r j_r} - \sum_{k=1}^{r-1} \delta_{j_k i_r} \tau_{i_1 \dots i_{r-1}, j_1 \dots j_{r-1}}^{(r-1)} (j_k \rightarrow j_r), \end{aligned} \quad (28)$$

式中  $\tau_{i_1 \dots i_{r-1}, j_1 \dots j_{r-1}}^{(r-1)} (j_k \rightarrow j_r)$  是把  $\tau_{i_1 \dots i_{r-1}, j_1 \dots j_{r-1}}^{(r-1)}$  的第二组下角标中的  $j_k$  换成  $j_r$  而得到的算符。此结果亦不难据(13), (14)和(26)式导出。

### 三、全同玻色子系统的二次量子化表象

将  $\varphi$  表象波函数空间  $\mathcal{Q}^{(N)}$  中具有粒子置换对称性的波函数的全体记为  $\mathcal{Q}_S^{(N)}$ , 它是  $\mathcal{Q}^{(N)}$  的子空间, 构成全同玻色子系统的 ( $\varphi$  表象) 波函数空间。我们今后把  $\mathcal{Q}_S^{(N)}$  叫做玻色子系统的二次量子化波函数空间, 其正交归一基显然应如下建立。

取  $|k_1 \dots k_N\rangle \in \mathcal{Q}^{(N)}$ , 令  $n_i = n_i(\mathbf{k})$  是由(18)式定义的非负整数, 称之为在单粒子态  $\varphi_i(\mathbf{x})$  的占据数。以  $S_N$  记由(15)式定义的全体  $N!$  个置换算符构成的集合, 以  $S_{\mathbf{k}}$  记由  $S_N$  中的恒等元及满足  $P|k_1 \dots k_N\rangle \approx |k_1 \dots k_N\rangle$  的元构成的集合, 它包含  $N! / \prod_{\alpha=1}^{\lambda} n_{\alpha}!$  个元素。定义

$$|n_1 \dots n_{\lambda}\rangle = \left( \prod_{\alpha=1}^{\lambda} n_{\alpha}! / N! \right)^{1/2} \sum_{P \in S_{\mathbf{k}}} P |k_1 \dots k_N\rangle. \quad (29)$$

易见, 所有这种形式的波函数组成  $\mathcal{Q}_S^{(N)}$  的正交归一基:

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_S^{(N)} &= \text{span} \left\{ |n_1 \dots n_{\lambda}\rangle : n_{\alpha} = 0, \dots, N; \sum_{\alpha=1}^{\lambda} n_{\alpha} = N \right\}, \\ \langle n_1 \dots n_{\lambda} | m_1 \dots m_{\lambda} \rangle &= \prod_{\alpha=1}^{\lambda} \delta_{n_{\alpha} m_{\alpha}}. \end{aligned} \quad (30)$$

此处  $\langle \cdot | \cdot \rangle$  是  $\mathcal{Q}^{(N)}$  中的内积符号  $(\cdot | \cdot)$  在  $\mathcal{Q}_S^{(N)}$  中的限制, 它们的涵义实际上是相同的。

算符的二次量子化表象是它的  $\varphi$  表象在  $\mathcal{Q}_S^{(N)}$  中的特殊形式, 亦即在  $\mathcal{Q}_S^{(N)}$  中的限制。

由(17)式知对任何  $\tau$  算符, 有

$$\tau_{ij} |n_1 \dots n_{\lambda}\rangle \in \mathcal{Q}_S^{(N)}, \quad (31)$$

而且据(20)和(29)式知

$$\tau_{ii} |n_1 \dots n_{\lambda}\rangle = n_i |n_1 \dots n_{\lambda}\rangle. \quad (32)$$

当  $i \neq j$  时, 由(17)和(21)式得

$$\tau_{ij} \sum_{P \in S_{\mathbf{k}}} P |k_1 \dots k_N\rangle = \sum_{P \in S_{\mathbf{k}}} P \sum_{\alpha=1}^N \delta_{j k_{\alpha}} |k_1 \dots k_N\rangle_{k_{\alpha} \rightarrow j}, \quad (33)$$

其右端是  $n_j \frac{N!}{n_1! \dots n_i! \dots n_j! \dots n_{\lambda}!} = (n_i + 1) \frac{N!}{n_1! \dots (n_i + 1)! \dots (n_j - 1)! \dots n_{\lambda}!}$  ↑

非零的  $P|k_1 \cdots k_N\rangle_{k_\alpha \rightarrow j \rightarrow i}$  之和。显然, 每个  $P|k_1 \cdots k_N\rangle_{k_\alpha \rightarrow j \rightarrow i}$  的单粒子态占据数为:  $i$  态由  $n_i$  增为  $n_i + 1$ ,  $j$  态由  $n_j$  减为  $n_j - 1$ , 其余  $\alpha (\neq i, j)$  态仍保持为  $n_\alpha$ 。综合以上分析得到

$$\tau_{ij} |\cdots n_i \cdots n_j \cdots\rangle = \sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_j} |\cdots (n_i + 1) \cdots (n_j - 1) \cdots\rangle, \quad (34)$$

当  $i \neq j$  时.

现将  $\mathcal{Q}_{FS}^{(0)}$  扩充为空间  $\mathcal{Q}_{FS}^{(\lambda)}$ :

$$\mathcal{Q}_{FS}^{(\lambda)} = \text{span}\{|n_1 \cdots n_\lambda\rangle; n_k = 0, 1, \cdots, \infty; k = 1, \cdots, \lambda\},$$

$$\langle n_1 \cdots n_\lambda | m_1 \cdots m_\lambda \rangle = \prod_{\alpha=1}^{\lambda} \delta_{n_\alpha m_\alpha}, \quad (35)$$

即在  $\mathcal{Q}_{FS}^{(\lambda)}$  中取消了  $\sum_{\alpha=1}^{\lambda} n_\alpha = N$  的限制, 而内积的定义与在  $\mathcal{Q}_{FS}^{(0)}$  中的相容。在  $\mathcal{Q}_{FS}^{(\lambda)}$  中定义湮没算符  $b_i$  及产生算符  $b_i^\dagger (i = 1, \cdots, \lambda)$ :

$$b_i |\cdots n_i \cdots\rangle = \sqrt{n_i} |\cdots (n_i - 1) \cdots\rangle,$$

$$b_i^\dagger |\cdots n_i \cdots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |\cdots (n_i + 1) \cdots\rangle. \quad (36)$$

它们互为厄密伴, 且满足下列对易关系:

$$[b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij}; [b_i, b_j] = [b_i^\dagger, b_j^\dagger] = 0. \quad (37)$$

利用(36)式可将(32)和(34)式统一成

$$\tau_{ij} = b_i^\dagger b_j. \quad (38)$$

把上式代入(23)式, 立即得到一次叠加型算符的二次量子化表象:

$$H^{(1)} = \sum_{i=1}^{\lambda} \sum_{j=1}^{\lambda} A_{i,j} b_i^\dagger b_j, \quad (39)$$

而由(24), (27), (36)和(37)式, 易得二次叠加型算符的二次量子化表象:

$$H^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{\lambda} \sum_{j=1}^{\lambda} \sum_{k=1}^{\lambda} \sum_{l=1}^{\lambda} B_{ij,kl} b_i^\dagger b_j^\dagger b_l b_k. \quad (40)$$

至于一般的  $r$  次叠加型算符, 利用(28)和(40)式以及前述的有关结果, 亦不难用归纳法得到其二次量子化表象:

$$H^{(r)} = \frac{1}{r!} \sum_{i_1=1}^{\lambda} \cdots \sum_{i_{r-1}=1}^{\lambda} \sum_{i_r=1}^{\lambda} \cdots \sum_{i_1=1}^{\lambda} B_{i_1 \cdots i_r, i_1 \cdots i_r} b_{i_1}^\dagger \cdots b_{i_r}^\dagger b_{i_r} \cdots b_{i_1}. \quad (41)$$

#### 四、全同费密子系统的二次量子化表象

把由  $\mathcal{Q}_N^{(0)}$  中全体具有粒子置换反对称性的波函数构成的子空间记为  $\mathcal{Q}_N^{(0)}$ , 它应是全同费密子系统的 ( $\varphi$  表象) 波函数空间, 称之为费密子系统的二次量子化表象的波函数空间。

取  $|k_1 \cdots k_N\rangle \in \mathcal{Q}_N^{(0)}$ , 它满足条件

$$k_1 < k_2 < \cdots < k_N. \quad (42)$$

设  $n_i = n_i(k)$  是由(18)式定义的单粒子态占据数, 在上式的限制下, 它只能取 0 和 1 两

个值. 令

$$|n_1 \cdots n_\lambda\rangle = (1/N!)^{1/2} \sum_{P \in S_N} (-1)^P P |k_1 \cdots k_N\rangle, \quad (43)$$

式中当  $P$  为偶和奇置换时,  $(-1)^P$  分别为 1 和  $-1$ . 显然, 所有这种形式的波函数构成  $\mathcal{Q}_{N\lambda}^{(\mathbb{P})}$  的正交归一基:

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_{N\lambda}^{(\mathbb{P})} &= \text{span} \left\{ |n_1 \cdots n_\lambda\rangle : n_k = 0, 1; \sum_{k=1}^{\lambda} n_k = N \right\}, \\ \langle n_1 \cdots n_\lambda | m_1 \cdots m_\lambda \rangle &= \prod_{\alpha=1}^{\lambda} \delta_{n_\alpha m_\alpha}. \end{aligned} \quad (44)$$

由(17)式有

$$\tau_{ij} |n_1 \cdots n_\lambda\rangle \in \mathcal{Q}_{N\lambda}^{(\mathbb{P})}, \quad (45)$$

再利用(20)式, 得

$$\tau_{ii} |n_1 \cdots n_\lambda\rangle = n_i |n_1 \cdots n_\lambda\rangle. \quad (46)$$

当  $i \neq j$  时, (21)和(42)式给出

$$\tau_{ij} |k_1 \cdots k_N\rangle = (1 - n_i) n_j |k_1 \cdots k_N\rangle_{j \rightarrow i}. \quad (47)$$

上式等号右端仅当  $n_i = 0$  和  $n_j = 1$  时才不为零. 其中  $|k_1 \cdots k_N\rangle_{j \rightarrow i}$  是将含于  $|k_1 \cdots k_N\rangle$  中的  $j$  换成  $i$  而得到的  $\mathcal{Q}_{N\lambda}^{(\mathbb{P})}$  的基. 由于小于  $j$  的  $k_\alpha$  有  $\sum_{\alpha < j} n_\alpha$  个, 故须经过

$$\left| \sum_{\alpha < i} n_\alpha - \sum_{\alpha < j} n_\alpha \right| = \left| \sum_{\alpha < i} n_\alpha + \sum_{\alpha < j} n_\alpha - 2 \sum_{\alpha < i} n_\alpha \right| \quad (48)$$

次对换, 才能将  $|k_1 \cdots k_N\rangle_{j \rightarrow i}$  调整得满足(42)式. 因此得到

$$\begin{aligned} \tau_{ij} |\cdots n_i \cdots n_j \cdots\rangle &= (1 - n_i) n_j (-1)^{\sum_{\alpha < i} n_\alpha + \sum_{\alpha < j} n_\alpha} |\cdots (n_i + 1) \cdots (n_j - 1) \cdots\rangle, \\ &\text{当 } i \neq j \text{ 时.} \end{aligned} \quad (49)$$

去掉  $\sum_{\alpha=1}^{\lambda} n_\alpha = N$  的限制并采用与  $\mathcal{Q}_{N\lambda}^{(\mathbb{P})}$  相容的内积定义, 我们将  $\mathcal{Q}_{N\lambda}^{(\mathbb{P})}$  扩充成空间  $\mathcal{Q}_{F\lambda}^{(\mathbb{P})}$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_{F\lambda}^{(\mathbb{P})} &= \text{span} \{ |n_1 \cdots n_\lambda\rangle : n_k = 0, 1; k = 1, \cdots, \lambda \}, \\ \langle n_1 \cdots n_\lambda | m_1 \cdots m_\lambda \rangle &= \prod_{\alpha=1}^{\lambda} \delta_{n_\alpha m_\alpha}, \end{aligned} \quad (50)$$

并在  $\mathcal{Q}_{F\lambda}^{(\mathbb{P})}$  上引入湮没算符  $a_i$  和产生算符  $a_i^+$  ( $i = 1, \cdots, \lambda$ ):

$$\begin{aligned} a_i |\cdots n_i \cdots\rangle &= (-1)^{\sum_{\alpha < i} n_\alpha} n_i |\cdots (n_i - 1) \cdots\rangle, \\ a_i^+ |\cdots n_i \cdots\rangle &= (-1)^{\sum_{\alpha < i} n_\alpha} (1 - n_i) |\cdots (n_i + 1) \cdots\rangle, \end{aligned} \quad (51)$$

它们互为共厄伴, 并遵从反对易关系

$$\{a_i, a_j^+\} = \delta_{ij}; \quad \{a_i, a_j\} = \{a_i^+, a_j^+\} = 0, \quad (52)$$

式中  $\{a, b\} = ab + ba$  表示反对易子.

利用(51)式, 可将(46)和(49)式统一成

$$\tau_{ij} = a_i^\dagger a_j. \quad (53)$$

根据本节和第二节的有关结果,采用导出(39)–(41)式的同样方法,容易得到一次、二次和  $r$  次叠加型算符的二次量子化表象:

$$H^{(1)} = \sum_{i=1}^{\lambda} \sum_{j=1}^{\lambda} A_{i,j} a_i^\dagger a_j, \quad (54)$$

$$H^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{\lambda} \sum_{j=1}^{\lambda} \sum_{k=1}^{\lambda} \sum_{l=1}^{\lambda} B_{i,l,k,j} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k, \quad (55)$$

$$H^{(r)} = \frac{1}{r!} \sum_{i_1=1}^{\lambda} \cdots \sum_{i_{r-1}=1}^{\lambda} \sum_{i_r=1}^{\lambda} \sum_{j_1=1}^{\lambda} \cdots \sum_{j_{r-1}=1}^{\lambda} B_{i_1, \dots, i_r, j_1, \dots, j_r} a_{i_1}^\dagger \cdots a_{i_r}^\dagger a_{j_1} \cdots a_{j_r}. \quad (56)$$

## 五、结语与讨论

本文采用新的方法,导出了全同玻色子系统和费密子系统的二次量子化表象,其步骤可归纳为:首先,在普通表象理论中引入  $\tau$  算符和  $\tau$  算符,并用它们来表述全同粒子系统的力学量(算符).这部分内容不过是将普通表象理论中的一些概念与做法稍加改造而已;其次,以明确的方式定义了两种系统的二次量子化表象的波函数空间,并求出  $\tau$  算符在其中的特殊表达式,这就自然而然地导致产生和湮没算符的引入;再次,在前两步的基础上,顺利地给出了力学量的二次量子化表象.各步所涉及的运算都是浅显的代数运算.

由此可见,与传统的FB方法相比,我们的方法具有概念清晰透彻和计算简捷初等的特点.这对于改进这种重要而且被广泛应用的表象的教学和加深人们对它的理解而言,大概都不无裨益吧.

最后我们要再一次指出:二次量子化表象是早已建立起来了的,本文不过给出一种新的、简单的导出方法而已.这种方法的精神其实已含在原来的结果中,例如从(39)–(41)和(54)–(56)诸式,便可想到必有(23)和(24)式成立.这一点, Jordan<sup>[12]</sup>于1932年在一篇短文中即曾提示,这给我们以启发,但很可惜他未就此深入下去.

感谢蒲富恪先生对本工作的支持.他还与作者们进行过有益的讨论.

- [1] P.A.M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. (London)*, **114A**(1927), 243.
- [2] P. Jordan and O.Klein, *Z. Phys.*, **45**(1927), 751; P.Jordan, *ibid.*, 776——对玻色子系统.
- [3] P.Jordan, *Z. Phys.*, **44**(1927), 473; P. Jordan and E. Wigner, *ibid.*, **47**(1928), 631——对费密子系统.
- [4] V.Fock, *Z.Phys.*, **75**(1932), 622.
- [5] H.H. Боголюбов, 量子统计学(中译本),科学出版社,北京(1959),第一章.
- [6] A.L. Fetter and J.D.Walecka, 多粒子系统的量子理论(中译本),科学出版社,北京(1984),第一章.
- [7] H. Umezawa, H. Masumoto and M. Tachiki, *Thermo Field Dynamics and Condensed States*, North-Holland Pub., Amsterdam (1982), Chap. 2.
- [8] 周世勋,量子力学,上海科学技术出版社,上海,(1961),第八章.
- [9] 曾谨言,量子力学(下册),科学出版社,北京,(1982),第十五章.
- [10] C.D.Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenum Press, New York, (1981), p. 14.
- [11] P.A.M.Dirac, 量子力学原理(中译本),科学出版社,北京,(1966).
- [12] P. Jordan. *Z. Phys.*, **75**(1932), 648.

## A SIMPLE ALGEBRAIC APPROACH TO THE SECOND QUANTIZATION REPRESENTATION

LI BO-ZANG WU JIAN-HUA

*Institute of Physics, Academia Sinica, Beijing 100080*

(Received 8 July 1991)

### ABSTRACT

In this work, a simple algebraic approach to the second quantization representation (SQR) for systems of many identical particles is developed. In comparison with the traditional method, our method is simpler and elementary in mathematical operation, as well as is more transparent in exploring the mathematical structure and physical meaning of wave functions and mechanical quantities in SQR.

**PACC:** 0365; 0530; 0200