



解决量子问题的原则

量子体系（或解决量子问题），从根本上说，就是建立各种表象以及找到各种表象之间的联系

Picture: 表象、绘景（提问）

例如：薛定谔表象 $\longleftrightarrow$ 各种相互作用表象

坐标表象 $\longleftrightarrow$ Fock态（粒子数）表象 $\longrightarrow$ 相干态表象

角动量的耦合表象 $\longleftrightarrow$ 非耦合表象

海森堡表象（绘景）

各种表象之间的变换只是数学形式不同，本质上描述的是同样的物理实在，表现为：在不同的表象中，物理量的期望值不变

提问：从测量的角度如何理解？

第二章 粒子数表象

一、全同粒子体系与交换对称性

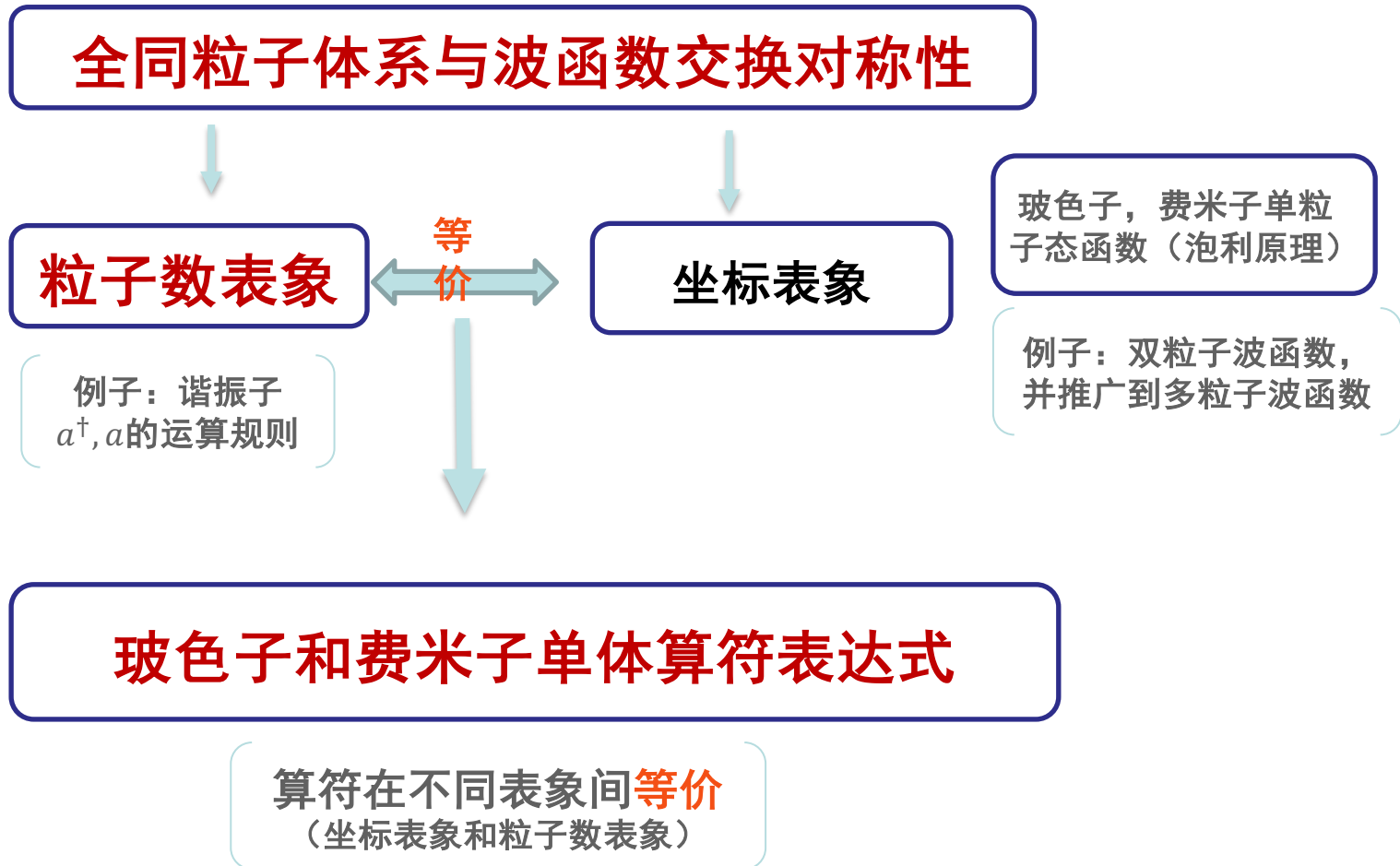
二、粒子数表象

三、玻色子和费米子单体算符表达式

四、二次量子化的由来

五、思考题（作业）

讲课原则：从“根”处开始



提问：两个全同费米子为什么不能处在同一个量子态上？
为什么玻色子可以凝聚在最低能态？（BEC）

一、全同粒子体系与交换对称性

1、全同粒子：微观世界中具有相同内禀属性的粒子

内秉属性：静质量、电荷、自旋、磁矩等

粒子：电子、质子、中子、光子、 π 介子等

- 宏观世界中，相同的物体用标号区分，即**坐标表象**
- 微观世界中，如果在坐标表象中，如何表达？（提问）
- **单粒子态：**无相互作用时，全同粒子体系中的单个粒子有相同（外界环境、物理条件相同）的单粒子态

参考书：曾谨言《量子力学》第三版 I中P109，452，II中P84

2. 全同粒子的特点：交换粒子的指标（编号） 不会导致物理量测量结果的改变

交换对称性

例子：氦原子中两电子组成体系的哈密顿量

$$\mathcal{H} = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|r_1 - r_2|}$$

$[P_{12}, \mathcal{H}] = 0$ 交换指标1, 2时，哈密顿量不变

P_{12} ：交换算符

交换对称性如何反映在波函数上？

3. 定义交换算符 P_{ij} ：第 i 个和第 j 个粒子交换指标

N 粒子体系波函数为 $\psi(q_1, q_2, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_N)$ ，将交换算符作用上去得到 $P_{ij}\psi(\dots, q_i, \dots, q_j, \dots) = \psi(\dots, q_j, \dots, q_i, \dots)$

如果作用两次，则回到原有的波函数

$$P_{ij}^2\psi(\dots, q_i, \dots, q_j, \dots) = \psi(\dots, q_i, \dots, q_j, \dots)$$

那么 P_{ij} 的本征值就需要满足 $P_{ij}^2\psi = \lambda^2\psi = \psi$

取 $\lambda = \pm 1$ ，就可以得到两种波函数

$P_{ij}\psi = \psi$	$\rightarrow$	波函数对称
$P_{ij}\psi = -\psi$	$\rightarrow$	波函数反对称

这暗示了自然界中仅有两类全同粒子

4. 玻色子与费米子的定义

	玻色子	费米子
自旋	$0\hbar, 1\hbar, 2\hbar \dots$	$\frac{\hbar}{2}, \frac{3\hbar}{2}, \frac{5\hbar}{2} \dots$
例子	光子、 π 介子	电子、质子
统计	玻色统计	费米统计
波函数	交换对称	交换反对称

思考：典型的玻色体系和费米体系的物理现象？

5. 两个全同粒子体系

- 单粒子态波函数 $h(q)\varphi_k(q) = \varepsilon_k\varphi_k(q)$
- 若 $\mathcal{H} = h(q_1) + h(q_2)$ ，并且只有两个单粒子态，且每个态上各有一个粒子，则 $\varphi_{k1}(q_1)\varphi_{k2}(q_2)$ ， $\varphi_{k1}(q_2)\varphi_{k2}(q_1)$ 以及它们的线性组合都是能量为 $\varepsilon_{k1} + \varepsilon_{k2}$ 的本征态。但对于其它的物理量，就不一定有交换简并了
- 如果：对其它物理量也应该满足交换简并
 ➡ 波函数交换对称或者反对称

- 玻色子体系：波函数交换对称（自己推）

当 $k_1 \neq k_2$ 时

$$\begin{aligned}\varphi_{k_1 k_2}^S(q_1, q_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + P_{12})\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_2}(q_2) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_2}(q_2) + \varphi_{k_1}(q_2)\varphi_{k_2}(q_1)]\end{aligned}$$

当 $k_1 = k_2$ 时

$$\varphi_{kk}^S(q_1, q_2) = \varphi_k(q_1)\varphi_k(q_2)$$

- 费米子体系：波函数交换反对称（自己推）

当 $k_1 \neq k_2$ 时

$$\varphi_{k_1 k_2}^A(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + P_{12}) \varphi_{k_1}(q_1) \varphi_{k_2}(q_2)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{k_1}(q_1) \varphi_{k_2}(q_2) - \varphi_{k_1}(q_2) \varphi_{k_2}(q_1)]$$

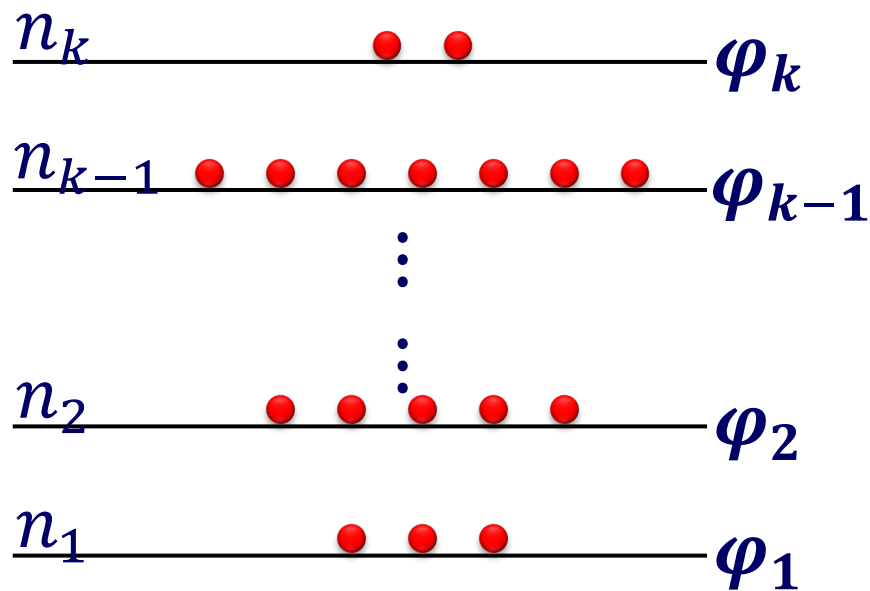
$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_{k_1}(q_1) & \varphi_{k_1}(q_2) \\ \varphi_{k_2}(q_1) & \varphi_{k_2}(q_2) \end{vmatrix}$$

当 $k_1 = k_2$ 时， $\varphi_{kk}^A(q_1, q_2) = 0$ 。

此时无物理意义，即泡利不相容原理，说明两个全同费米子不能处在同一个粒子态上

6. N个玻色子和费米子体系的波函数（坐标表象）

- N个玻色子体系：可以有任意个玻色子处于相同的单粒子态（如BEC）。如果N个玻色子处于k个态。记 n_1 个处于第一个态， n_2 个处于第二个态， n_k 个处于第k个态，则 $\sum_{i=1}^k n_i = N$ 。



由玻色子交换对称性可以得到

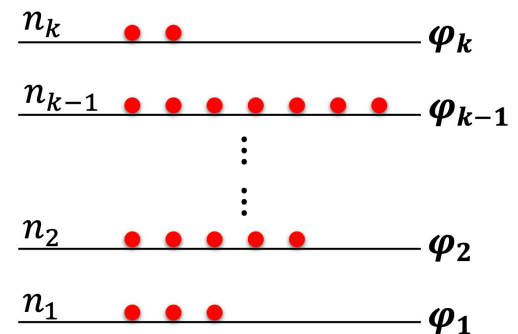
$$\psi_{n_1, \dots, n_k}^S(q_1, q_2, \dots, q_N)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{Norm}} \sum_P \underbrace{[\varphi_1(q_1) \dots \varphi_1(q_{n_1})]}_{n_1 \text{ 个 } \varphi_1 \text{ 波函数}} \underbrace{\varphi_2(q_{n_1+1}) \dots \varphi_2(q_{n_1+n_2}) \dots}_{n_2 \text{ 个 } \varphi_2 \text{ 波函数}} \dots$$

$$\underbrace{\varphi_k(q_N)}_{n_k \text{ 个 } \varphi_k \text{ 波函数}}]$$

求和号下的 P 表示取遍所有置换的结果

- 取遍所有置换的态个数是 $Norm$ 个



$$Norm = \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_k!} = \frac{N!}{\prod_{i=1}^k n_i!}$$

于是, N 个玻色子体系波函数可以写成

$$\psi_{n_1, \dots, n_k}^S(q_1, q_2, \dots, q_N) = \sqrt{\frac{\prod_{i=1}^k n_i!}{N!}} \sum_P [\varphi_{k1}(q_1) \dots \varphi_{kN}(q_N)]$$

- N个费米子体系： N 个费米子分别处于 $1, 2, 3, \dots, N$ 态上，反对称波函数如下：

$$\begin{aligned} & \psi_{1, \dots, N}^A(q_1, q_2, \dots, q_N) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(q_1) & \cdots & \cdots & \varphi_1(q_N) \\ \varphi_2(q_1) & \ddots & \cdots & \varphi_2(q_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_N(q_1) & \cdots & \cdots & \varphi_N(q_N) \end{vmatrix} \end{aligned}$$

这也称作Slater行列式。

如果有两个粒子处在同一个单粒子态上，行列式为零，**再次验证泡利不相容原理**

第二章 粒子数表象

一、全同粒子体系与交换对称性

二、粒子数表象

三、玻色子和费米子单体算符表达式

四、二次量子化的由来

五、思考题（作业）

二、粒子数表象

粒子数表象：仅用粒子数目来表示全同粒子体系中单粒子态的占据情况

	玻色子	费米子
坐标表象	$\psi_{n_1, \dots, n_k}^S(q_1, q_2, \dots, q_N)$	$\psi_{1, \dots, N}^A(q_1, q_2, \dots, q_N)$
	两者等价	
粒子数表象	$ n_1 n_2 \dots n_k\rangle$	$ \alpha\beta\gamma \dots\rangle$ 或 $ 1_\alpha 1_\beta 1_\gamma \dots\rangle$

全同体系中 q_i, q_j 在 φ^S 和 φ^A 中地位均等，编号没有意义
只用每个单粒子态上的占据数表示就可以了

2.1 粒子数表象中的升降算符表示

粒子数表象中的升降算符也叫产生湮灭算符(creation & annihilation operators)

i. 玻色子体系中，升降算符定义为（注意：用一个粒子定义的）

$$|1_\alpha 1_\beta 1_\gamma \dots\rangle = a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\gamma^\dagger \dots |0_\alpha 0_\beta 0_\gamma \dots\rangle = a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\gamma^\dagger \dots |0\rangle$$

$$a_\alpha a_\beta a_\gamma \dots |1_\alpha 1_\beta 1_\gamma \dots\rangle = |0\rangle \neq 0$$

伴式为

$$\langle \dots \mathbf{1}_\gamma \mathbf{1}_\beta \mathbf{1}_\alpha | = \langle 0 | \dots a_\gamma a_\beta a_\alpha$$

在各个模式独立的情况下，只考虑第一个模式

$$|1_\alpha\rangle = a_\alpha^\dagger |0\rangle$$

问题：那么 $|n_\alpha\rangle = (a_\alpha^\dagger)^n |0\rangle$ 是否正确呢？

ii. 费米子体系中，升降算符定义为

$$|1_\alpha 1_\beta 1_\gamma \dots\rangle = |\alpha\beta\gamma \dots\rangle = a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\gamma^\dagger \dots |0\rangle$$

$$\dots a_\gamma a_\beta a_\alpha |\alpha\beta\gamma \dots\rangle = |0\rangle \neq 0$$

伴式为

$$\langle \dots \gamma\beta\alpha| = \langle 0| \dots a_\gamma a_\beta a_\alpha$$

只考虑一个费米子

$$|\alpha\rangle = a_\alpha^\dagger |0\rangle$$

2.2 升降算符的运算规则

思考：粒子数表象中，玻色子体系和费米子体系的升降算符 a 和 $a^\dagger$ 的排布的顺序如何？

考虑一个两粒子体系，单粒子态波函数为 φ_α 和 φ_β 。

i. 玻色子体系

坐标表象： $\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_\alpha(q_1)\varphi_\beta(q_2) + \varphi_\alpha(q_2)\varphi_\beta(q_1)]$

粒子数表象： $|1_1, 1_2\rangle = a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger |0\rangle$

由于玻色子体系波函数交换对称， $|1_1, 1_2\rangle = |1_2, 1_1\rangle$ 。所以

$$a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger = a_\beta^\dagger a_\alpha^\dagger$$

ii. 费米子体系

坐标表象： $\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_\alpha(q_1)\varphi_\beta(q_2) - \varphi_\alpha(q_2)\varphi_\beta(q_1)]$

粒子数表象： $|\alpha, \beta\rangle = a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger |0\rangle$

由于费米子波函数交换反对称， $|\alpha, \beta\rangle = -|\beta, \alpha\rangle$ 。所以

$$a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger = -a_\beta^\dagger a_\alpha^\dagger$$

也记为

$$[a_\alpha^\dagger, a_\beta^\dagger]_+ = 0$$

同理可证 $[a_\alpha, a_\beta]_+ = 0$

后面会用到这个性质：**越过一个单粒子态，就改变一次符号**

并且 $\alpha = \beta$ 时， $a_\beta^\dagger a_\beta^\dagger = a_\alpha^\dagger a_\alpha^\dagger = 0$ ，又一次验证了泡利不相容原理

以三个全同费米粒子为例

对于产生算符

$$\begin{aligned}a_1^\dagger a_2^\dagger a_3^\dagger |0_1, 0_2, 0_3\rangle &= a_1^\dagger a_2^\dagger a_3^\dagger |0_3, 0_2, 0_1\rangle \\&= a_1^\dagger a_2^\dagger |1_3, 0_2, 0_1\rangle = a_1^\dagger a_2^\dagger |0_2, 1_3, 0_1\rangle \\&= a_1^\dagger |1_2, 1_3, 0_1\rangle = a_1^\dagger |1_2, 0_1, 1_3\rangle \\&= a_1^\dagger |0_1, 1_2, 1_3\rangle = |\mathbf{1}_1, \mathbf{1}_2, \mathbf{1}_3\rangle\end{aligned}$$

对于湮灭算符

$$\begin{aligned}a_1 a_2 a_3 |1_1, 1_2, 1_3\rangle &= a_1 a_2 a_3 |1_3, 1_1, 1_2\rangle (\text{两次交换}) \\&= a_1 a_2 |0_3, 1_1, 1_2\rangle = -a_1 a_2 |1_2, 0_3, 1_1\rangle (\text{两次交换}) \\&= -a_1 |0_2, 0_3, 1_1\rangle = -a_1 |1_1, 0_2, 0_3\rangle (\text{两次交换}) \\&= -|\mathbf{0}_1, \mathbf{0}_2, \mathbf{0}_3\rangle\end{aligned}$$

$$a_1 a_2 a_3 \dots a_n |1_1, 1_2, 1_3, \dots 1_n\rangle = (-1)^{\frac{n(n-1)}{2}} |\mathbf{0}_1, \mathbf{0}_2, \mathbf{0}_3, \dots \mathbf{0}_n\rangle$$

玻色子体系

- 证明 $[a_\alpha^\dagger, a_\beta] = 0 \ (\alpha \neq \beta)$ (自己推)

这个性质来源于玻色子波函数的交换对称性

$$\begin{aligned} a_\beta \underline{a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\gamma^\dagger} \dots |0\rangle &= +a_\beta \underline{a_\beta^\dagger a_\alpha^\dagger a_\gamma^\dagger} \dots |0\rangle \\ &= +a_\alpha^\dagger a_\gamma^\dagger \dots |0\rangle \\ &= +a_\alpha^\dagger \underline{a_\beta a_\beta^\dagger} a_\gamma^\dagger \dots |0\rangle \end{aligned}$$

$$\text{所以 } a_\beta a_\alpha^\dagger = a_\alpha^\dagger a_\beta$$

玻色子体系最重要的对易关系： $[a_\alpha, a_\alpha^\dagger] = 1$

- 下面可以看到：利用 $[a_\alpha, a_\alpha^\dagger] = 1$ 以及波函数的交换对称性，可以得到玻色子体系的所有性质

($[a_\alpha, a_\alpha^\dagger] = 1$ 来源于量子力学基本假设： $[x, p] = i\hbar$)

下面几页将**证明**只有一个单粒子态 k 时 (可表示为 $|n_k\rangle$)
递推关系和粒子数算符的本征值、本征态

(回答其中一个问题： $|n_\alpha\rangle = (a_\alpha^\dagger)^n |0\rangle$ 是否正确呢？)

以下的**证明**参考了田光善老师的《高等量子力学讲义》

下面推导玻色子体系中的递推关系： $|n_k = n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_k^\dagger)^n|0\rangle$

要想生成 $|n_k\rangle$, 就需要 $\hat{a}_k^\dagger$ 作用在 $|0_k\rangle$ 上 n 次, 即

$$(\hat{a}_k^\dagger)^n |0\rangle = d_n |n_k = n\rangle$$

若算符 $\hat{n}_k = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$, 则

$$\hat{n}_k (\hat{a}_k^\dagger)^n |0\rangle = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k (\hat{a}_k^\dagger)^n |0\rangle$$

利用基本对易式： $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} + [\hat{A}, \hat{B}]$

我们得到 (A) 式：

$$\hat{n}_k (\hat{a}_k^\dagger)^n |0\rangle = (\hat{a}_k^\dagger)^n \hat{n}_k |0\rangle + [\hat{n}_k, (\hat{a}_k^\dagger)^n] |0\rangle = [\hat{n}_k, (\hat{a}_k^\dagger)^n] |0\rangle$$

利用恒等关系式：

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\cdots\hat{M}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}\cdots\hat{M} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]\cdots\hat{M} + \hat{B}\hat{C}\cdots[\hat{A}, \hat{M}]$$

可以得到：

$$[\hat{n}_k, (\hat{a}_k^\dagger)^n] = [\hat{n}_k, \hat{a}_k^\dagger](\hat{a}_k^\dagger)^{n-1} + \cdots + (\hat{a}_k^\dagger)^{n-1}[\hat{n}_k, \hat{a}_k^\dagger] = n(\hat{a}_k^\dagger)^n$$

代入上页的 (A) 式，得到：

$$\hat{n}_k \left((\hat{a}_k^\dagger)^n |0\rangle \right) = n \left((\hat{a}_k^\dagger)^n |0\rangle \right)$$

也就是说： $(\hat{a}_k^\dagger)^n |0\rangle$ 是算符 $\hat{n}_k$ 的本征态，本征值是 n

下面就是要确定归一化系数 d_n

$$(\hat{a}_k^\dagger)^n |0\rangle = d_n |n_k = n\rangle$$

根据归一化条件，可以得到：（自己推）

$$\begin{aligned} I_n &\equiv \langle 0 | (\hat{a}_k)^n (\hat{a}_k^\dagger)^n | 0 \rangle = \langle 0 | (\hat{a}_k)^{n-1} \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger (\hat{a}_k^\dagger)^{n-1} | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | (\hat{a}_k)^{n-1} (1 + \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k) (\hat{a}_k^\dagger)^{n-1} | 0 \rangle = I_{n-1} + \langle 0 | (\hat{a}_k)^{n-1} (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k) (\hat{a}_k^\dagger)^{n-1} | 0 \rangle \\ &= I_{n-1} + (n-1) \langle 0 | (\hat{a}_k)^{n-1} (\hat{a}_k^\dagger)^{n-1} | 0 \rangle \\ &= n I_{n-1} = n \cdot (n-1) I_{n-2} = \cdots = n \cdot (n-1) \cdots 2 \cdot 1 \cdot I_0. \end{aligned}$$

已经知道： $I_0 = \langle 0|0 \rangle = 1$ 所以有： $I_n = n!$

最后可以得到（B）式：

$$|n_k = n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}_k^\dagger)^n |0\rangle$$

从 (B) 式，我们可以得到以下递推关系：（自己推）

$$\hat{a}_k^\dagger |n_k = n\rangle = \sqrt{n+1} |n_k = n+1\rangle$$

$$\hat{a}_k |n_k = n\rangle = \sqrt{n} |n_k = n-1\rangle$$

同时可验证： $\hat{n}_k |n\rangle = n|n\rangle$

最后，多维（模式）玻色子体系的粒子数态可以写为：

$$|n_{k_1}, n_{k_2}, \dots, n_{k_N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_{k_1}! n_{k_2}! \dots n_{k_N}!}} (\hat{a}_{k_1}^\dagger)^{n_{k_1}} \dots (\hat{a}_{k_N}^\dagger)^{n_{k_N}} |0\rangle$$

综合以上情况，玻色子体系有以下性质：

$$\left\{ \begin{array}{l} [a_\alpha, a_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha\beta} \\ [a_\alpha^\dagger, a_\beta^\dagger] = [a_\alpha, a_\beta] = 0 \end{array} \right. \quad \hat{n}_k |n\rangle = n|n\rangle$$

以及相邻粒子数态间的递推关系

$$|n_k = n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}_k^\dagger)^n |0\rangle$$

$$\hat{a}_k^\dagger |n_k = n\rangle = \sqrt{n+1} |n_k = n+1\rangle$$

$$\hat{a}_k |n_k = n\rangle = \sqrt{n} |n_k = n-1\rangle$$

至此，玻色子的
粒子数表象
建立起来了

ii. 费米子体系（和21页同）

坐标表象： $\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_\alpha(q_1)\varphi_\beta(q_2) - \varphi_\alpha(q_2)\varphi_\beta(q_1)]$

粒子数表象： $|\alpha, \beta\rangle = a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger |0\rangle$

由于费米子波函数交换反对称， $|\alpha, \beta\rangle = -|\beta, \alpha\rangle$ 。所以

$$a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger = -a_\beta^\dagger a_\alpha^\dagger$$

也记为

$$[a_\alpha^\dagger, a_\beta^\dagger]_+ = 0$$

同理可证 $[a_\alpha, a_\beta]_+ = 0$

后面会用到这个性质：**越过一个单粒子态，就改变一次符号**

并且 $\alpha = \beta$ 时， $a_\beta^\dagger a_\beta^\dagger = a_\alpha^\dagger a_\alpha^\dagger = 0$ ，又一次验证了泡利不相容原理

费米子体系

- 证明 $[a_\alpha^\dagger, a_\beta]_+ = 0 \ (\alpha \neq \beta)$ (自己推)

这个性质来源于波函数的交换反对称

$$\begin{aligned} \underline{a_\beta a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\gamma^\dagger} \dots |0\rangle &= -\underline{a_\beta a_\beta^\dagger a_\alpha^\dagger a_\gamma^\dagger} \dots |0\rangle \\ &= -a_\alpha^\dagger a_\gamma^\dagger \dots |0\rangle \\ &= -\underline{a_\alpha^\dagger a_\beta a_\beta^\dagger a_\gamma^\dagger} \dots |0\rangle \end{aligned}$$

$$\text{所以 } a_\beta a_\alpha^\dagger + a_\alpha^\dagger a_\beta = 0$$

- 费米子体系中，可以验证： $[a_\alpha, a_\alpha^\dagger]_+ = 1$ （自己推）
- 特别说明：对易关系不是全同性带来，而是费米子特有的性质

(1) $|\alpha\rangle$ 态占据

$$a_\alpha a_\alpha^\dagger |\alpha\beta\gamma \dots\rangle = a_\alpha \underline{a_\alpha^\dagger a_\alpha^\dagger} a_\beta^\dagger a_\gamma^\dagger \dots |0\rangle = 0$$

$$a_\alpha^\dagger a_\alpha |\alpha\beta\gamma \dots\rangle = a_\alpha^\dagger |\beta\gamma \dots\rangle = |\alpha\beta\gamma \dots\rangle$$

$$\text{两式相加可得 } a_\alpha a_\alpha^\dagger + a_\alpha^\dagger a_\alpha = 1$$

(1) $|\alpha\rangle$ 态不占据

$$a_\alpha a_\alpha^\dagger |\beta\gamma \dots\rangle = a_\alpha |\alpha\beta\gamma \dots\rangle = |\beta\gamma \dots\rangle$$

$$a_\alpha^\dagger a_\alpha |\beta\gamma \dots\rangle = 0$$

$$\text{两式相加可得 } a_\alpha a_\alpha^\dagger + a_\alpha^\dagger a_\alpha = 1$$

综合以上情况，费米子体系有性质

$$\begin{cases} [a_{\alpha}^{\dagger}, a_{\beta}]_{+} = \delta_{\alpha\beta} \\ [a_{\alpha}^{\dagger}, a_{\beta}^{\dagger}]_{+} = [a_{\alpha}, a_{\beta}]_{+} = 0 \end{cases}$$

- $a_{\alpha}, a_{\alpha}^{\dagger}$ 作用在费米子粒子数态上的一般规则

$$a_{\alpha}^{\dagger} |\dots n_{\alpha} \dots\rangle = (-1)^{\sum_{i=1}^{\alpha-1} n_i} |\dots 1_{\alpha} \dots\rangle \delta_{n_{\alpha}, 0}$$

$$a_{\alpha} |\dots n_{\alpha} \dots\rangle = (-1)^{\sum_{i=1}^{\alpha-1} n_i} |\dots 0_{\alpha} \dots\rangle \delta_{n_{\alpha}, 1}$$

$a_{\alpha}^{\dagger}$ 要越过 $(a_1^{\dagger})^{n_1}, \dots, (a_{\alpha-1}^{\dagger})^{n_{\alpha-1}}$ 才能对 $|n_{\alpha}\rangle$ 态起作用

至此，费米子的粒子数表象建立起来了

总之：

由粒子的全同性（波函数的交换对称性）+ 对易关系，
玻色子和费米子体系的所有性质都可以得到
即粒子数表象建立

下面将以一维谐振子的量子化为例说明玻色子体系的情况
当然，一维谐振子只是玻色子体系的一个特例

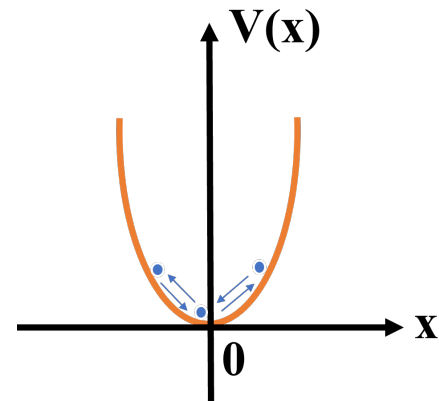


2.3 一维谐振子的量子化

a) 一维谐振子的量子化过程

- i. 目的：腔中电磁场的哈密顿量与谐振子有相同的形式，量子化后产生的“量子”应具有相同的形式或性质
- ii. Model setup: 问题是什么？

$$\mathcal{H} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2, \quad \omega_0 = \sqrt{k/m}$$



经典情况下，利用 $F = ma$ 求运动方程，发现模式是连续的，能量也是连续的。而量子力学中，能量是分立的、不连续的。

代入定态薛定谔方程：

$$\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

寻找 $\mathcal{H}$ 的一系列本征值 $E_n, n = 0, 1, 2, \dots$

iii. 具体求解过程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2\right) \psi(x) = E \psi(x) \quad (1)$$

- 考虑边界条件 $x \rightarrow \pm\infty$ 时, $\psi(x) \rightarrow 0$
- 作代换 $\xi = \alpha x$, $\lambda = \frac{E_0}{\hbar\omega_0/2}$, 其中 $\alpha = \sqrt{m\omega_0/\hbar}$, 原方程(1)

变为

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\psi = 0 \quad (2)$$

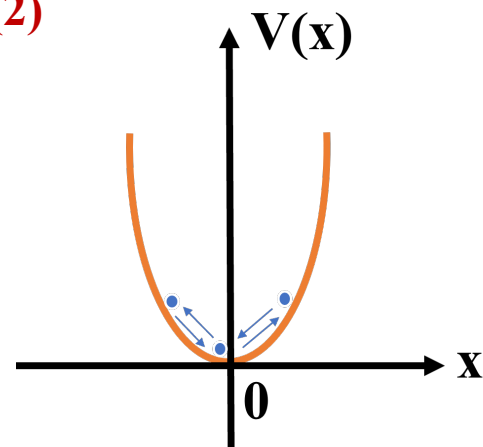
$\xi \rightarrow \pm\infty$ 时, 方程可渐进为

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \xi^2\psi = 0$$

其通解为 $\psi = C e^{\pm\xi^2/2}$

- 根据波函数的特性, 得到 $\psi = C e^{-\xi^2/2}$ 。
- 由此得到方程的通解为 $\psi = e^{-\frac{\xi^2}{2}} u(\xi)$, 代入(2)得

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} - 2\xi \frac{du}{d\xi} + (\lambda - 1)u = 0 \quad (3)$$



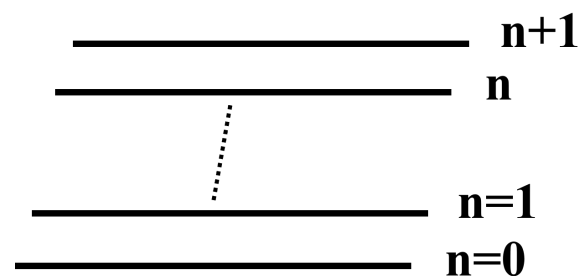
iv. 解是什么?

- $\lambda = 2n + 1$ 符合方程 (3) 和边界条件, 解得能量本征值

为 $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0$ 。其中 $n = 0, 1, 2, \dots$

- 解得的波函数为

$$\psi_n(x) = N_n e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} H_n(\alpha x)$$



其中 $N_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}}$, $H_n(\alpha x)$ 为 Hermite 多项式

注意: 这和之前的粒子数态 $|n\rangle$ 相联系

v. 讨论

- 能级分立，并且均匀分布，能量基态为 $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0$
- $\psi_n(x)$ 正交完备
- 正则变换

在 $\hat{\mathcal{H}} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2$ 中，令 $\hbar = \omega_0 = m = 1$ ，就可以得到

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} (x^2 + p^2)$$

$$\text{令} \begin{cases} a = (x + ip)/\sqrt{2} \\ a^\dagger = (x - ip)/\sqrt{2} \end{cases}, \text{ 于是 } \begin{cases} x = (a + a^\dagger)/\sqrt{2} \\ p = -i(a - a^\dagger)/\sqrt{2} \end{cases},$$

可得 $\hat{\mathcal{H}} = (a^\dagger a + 1/2) \hbar \omega_0$

由 $[x, p] = i$ ，可推得 $[a, a^\dagger] = 1$

b) Fock态 (粒子数态)

i. 问题：找出 $\hat{\mathcal{H}} = (a^\dagger a + 1/2)\hbar\omega_0$ 的本征态 ($[a, a^\dagger] = 1$)

定义 number operator $\hat{n} = a^\dagger a$, 那么 $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{n}] = 0$ 。则 $\hat{\mathcal{H}}, \hat{n}$ 有共同本征态 $|n\rangle$ 。即为 Fock 态, 也叫粒子数态 (number state)。

假设 $\hat{\mathcal{H}}|n\rangle = E_n|n\rangle$, $E_n = ?$

首先证明: $a|n\rangle$ 和 $a^\dagger|n\rangle$ 也是 $\hat{\mathcal{H}}$ 的本征态, 但与 $|n\rangle$ 差一个量子 (这里是声子, 也可能是光子), 即:

$$\mathcal{H}a|n\rangle = (E_n - \hbar\omega_0)a|n\rangle$$

$$\mathcal{H}a^\dagger|n\rangle = (E_n + \hbar\omega_0)a^\dagger|n\rangle$$

证明：利用 $[a, a^\dagger] = 1$ （自己推）

$$\begin{aligned}\mathcal{H}a|n\rangle &= \hbar\omega_0(a^\dagger a + 1/2)a|n\rangle = \hbar\omega_0(aa^\dagger - 1/2)a|n\rangle \\ &= a\left[\hbar\omega_0\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega_0\right]|n\rangle = (E_n - \hbar\omega_0)a|n\rangle\end{aligned}$$

第二式同理可证。

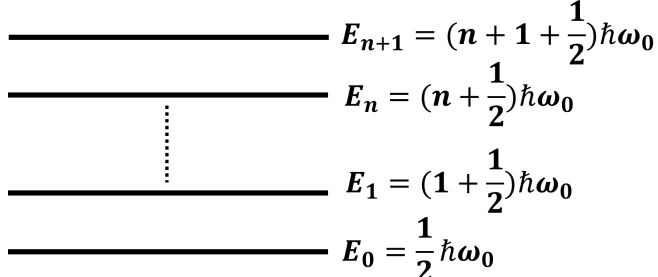
	$a n\rangle$	$ n\rangle$	$a^\dagger n\rangle$
能量本征值	$E_n - \hbar\omega_0$	E_n	$E_n + \hbar\omega_0$
本征态	$ n-1\rangle$	$ n\rangle$	$ n+1\rangle$

相邻本征能量之间差一个量子

ii. 确定 E_n 的值：能量量子性的体现

下界：

重复 $a|n\rangle$ 操作 n 次后，得到 $\mathcal{H}a|0\rangle = (E_0 - \hbar\omega_0)a|0\rangle$ 。而 $E_0 - \hbar\omega_0$ 比基态能量 E_0 低，物理上不合理，所以 $a|0\rangle = 0$ 。从而，

$$\mathcal{H}|0\rangle = \hbar\omega_0(a^\dagger a + 1/2)|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega_0|0\rangle$$


零点能量 $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$ 为半个量子，这是谐振子体系能量的下界

上界： $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$ ，当 $n \rightarrow \infty$ 时能量无上界

- Fock态的重要性（量子光学中光子的角度）

能级问题： $m\hbar\omega_0$ ，其中 m 为整数，只有 ω_0 的整数倍，包含 m 个光子的能量

以上建立的是Fock态表象，将来的相干态（压缩态）表象是Fock态的某种叠加（表象变换），即 $|\alpha\rangle = \sum_n c_n(t)|n\rangle$

思考：Fock态的能级为什么是等间隔的？

iii. $|n\rangle$ 与 $|n+1\rangle$ 的递推关系（自己推）

由于 $a|n\rangle$ 是 $\mathcal{H}$ 能量为 $E_n - \hbar\omega_0$ 的本征态，所以

$$a|n\rangle = x|n-1\rangle \Leftrightarrow |n-1\rangle = (a/x)|n\rangle$$

由于波函数的正交归一性

$$\langle n-1|n-1\rangle = 1 \Rightarrow \frac{1}{x^2} \langle n|a^\dagger a|n\rangle = 1 \Rightarrow x = \sqrt{n}$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

同理可得

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

递推可以得到 $|n\rangle$ 与 $|0\rangle$ 之间的关系

$$|n\rangle = \frac{a^{\dagger n}}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

到这里，玻色子全同粒子体系中， $\hat{\mathcal{H}}$ 和 $\hat{n}$ 的本征态和本征值以及它们之间的联系找到了-----表象建立起来了

iv. 真空（态）涨落(vacuum (state) fluctuation):

真空态 $|0\rangle$ 下物理量的涨落, $|0\rangle$ 是一系列粒子数态 $|n\rangle$ 中的最低（粒子数和能量）态；在 $|n\rangle$ 上粒子数和能量不涨落，其它物理量（和 H 不对易）涨落

---真空涨落实际上是真空态下其它物理量（和 H 不对易）的涨落

v. 推广到多维谐振子体系

$$\text{一维} \rightarrow \hat{H} = \hbar\omega_0 \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \rightarrow |n\rangle$$

$$\text{多维} \rightarrow \hat{H} = \sum_k \hbar\omega_k \left(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \right) \rightarrow |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle \equiv |\{n_k\}\rangle$$

物理上说，多维模式间是相互独立的

第二章 粒子数表象

一、全同粒子体系与交换对称性

二、粒子数表象

三、玻色子和费米子单体算符表达式

四、二次量子化的由来

五、思考题（作业）

三、玻色子和费米子单体算符表达式

1. 玻色子体系单体算符

坐标表象中： $\hat{F} = \sum_{i=1}^N \hat{f}(q_i)$

其中， q_i 为粒子的指标， $\hat{f}$ 为单粒子算符。 $\hat{F}$ 可以是N个粒子的总能量、总动量或者总粒子数等等

粒子数表象中： $\hat{F} = \sum_{\alpha,\beta} f_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}$

其中， α, β 为单粒子态的标记。 $f_{\alpha\beta} = \langle \varphi_{\alpha} | \hat{f} | \varphi_{\beta} \rangle$ 为单粒子态下的算符矩阵元

(问题)

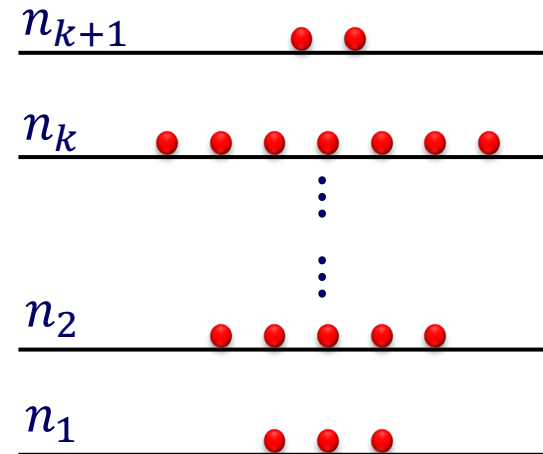
下面验证粒子数表象中 $\hat{F}$ 的正确性

- **说明：**单体算符 $\hat{f}(q)$ 应该只涉及一个粒子的某种物理量改变，而不涉及其他粒子。所以 $\hat{f}$ 只能在初末态相同时，或初末态只差一个单粒子数时， $\hat{f}$ 的矩阵元才不为0

i. 坐标表象中（图）

$$\psi_{n_1, \dots, n_k}(q_1, \dots, q_N)$$

$$= \sqrt{\frac{\prod_i n_i!}{N!}} \sum_P \varphi_1(q_1) \dots \varphi_1(q_{n_1}) \varphi_2(q_{n_1+1}) \dots \varphi_2(q_{n_1+n_2}) \dots \varphi_k(q_N)$$



求和号下的 P 表示取遍所有置换的结果

计算 $\hat{F}$ 的各矩阵元有

$$\hat{F} = \sum_{i=1}^N \hat{f}(q_i)$$

$$\langle \psi_{n_1, \dots, n_k} | \hat{F} | \psi_{n'_1, \dots, n'_k} \rangle = \sum_i \langle \psi_{n_1, \dots, n_k} | \hat{f}(q_i) | \psi_{n'_1, \dots, n'_k} \rangle$$

由于每个 $\hat{f}(q_i)$ 在波函数中的地位均等，所以表达式应该相同，可得

$$\langle \psi_{n_1, \dots, n_k} | \hat{F} | \psi_{n'_1, \dots, n'_k} \rangle = N \langle \psi_{n_1, \dots, n_k} | \hat{f}(q_1) | \psi_{n'_1, \dots, n'_k} \rangle$$

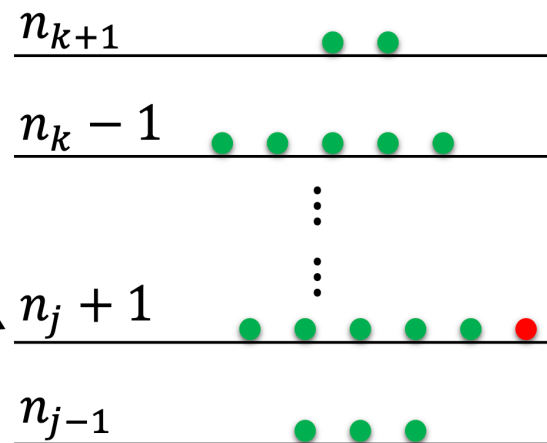
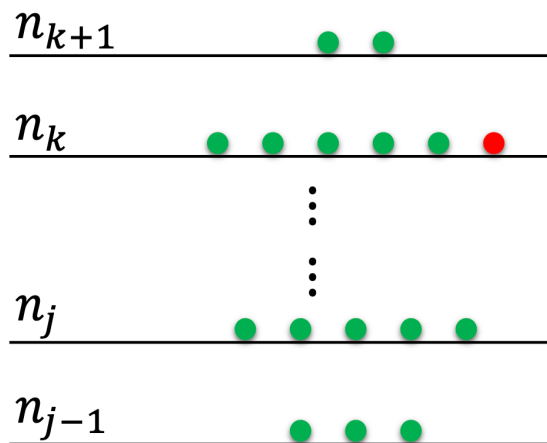
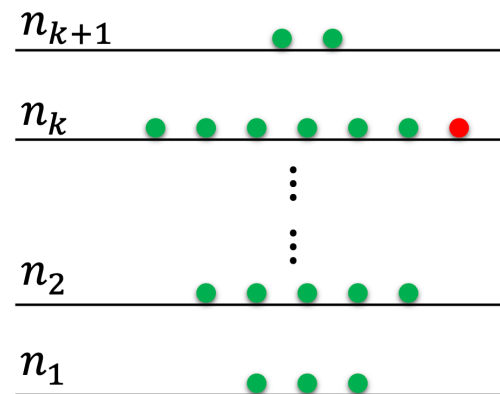
(1) 初末态相同时，设 q_1 粒子为 φ_k 态，则 $f_{kk} = \langle \varphi_k(q_1) | \hat{f}(q_1) | \varphi_k(q_1) \rangle$ 。其余

$N-1$ 个粒子有 $\frac{(N-1)!}{n_1!n_2!\dots n_{k-1}!(n_k-1)!n_{k+1}!\dots}$ 种排布方式，可得

$$\begin{aligned} & \langle \psi_{n_1, \dots, n_k} | \hat{F} | \psi_{n_1, \dots, n_k} \rangle \\ &= N \sqrt{\frac{\prod_i n_i!}{N!}} \sqrt{\frac{\prod_i n_i!}{N!}} \sum_k \frac{(N-1)!}{n_1!n_2!\dots n_{k-1}!(n_k-1)!n_{k+1}!\dots} f_{kk} \\ &= \sum_k n_k f_{kk} \end{aligned}$$

初末态相同时（右）

初末态不同时（下）



(2) 初末态只差一个单粒子时（图）：设 q_1 粒子由 φ_k 态变为 φ_j 态。则

初态为 $\psi_{n_1, \dots, n_j, \dots, n_k, \dots}$ ，末态为 $\psi_{n_1, \dots, n_j+1, \dots, n_k-1, \dots}$ 。对应的单粒子算符

矩阵元为 f_{jk} ， $f_{jk} = \langle \varphi_j(q_1) | \hat{f}(q_1) | \varphi_k(q_1) \rangle$

此时其余 $N-1$ 个粒子有 $\frac{(N-1)!}{n_1! n_2! \dots n_j! \dots (n_k-1)! \dots}$ 种排布方式（ n_i 可能是0），

可得

$$\begin{aligned}
 & \left\langle \psi_{n_1, \dots, n_j+1, \dots, n_k-1, \dots} \left| \hat{F} \right| \psi_{n_1, \dots, n_j, \dots, n_k, \dots} \right\rangle \\
 &= N \sqrt{\frac{n_1! \dots (n_j+1)! \dots (n_k-1)! \dots}{N!}} \sqrt{\frac{n_1! \dots n_j! \dots n_k! \dots}{N!}} \frac{(N-1)!}{n_1! n_2! \dots n_j! \dots (n_k-1)! \dots} f_{jk} \\
 &= \sqrt{(n_j+1)n_k} f_{jk}
 \end{aligned}$$

以初态为 $|2, 1, 0\rangle$ 为例

$$\psi(q_1, q_2, q_3)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3}} [\varphi_1(q_1)\varphi_1(q_2)\varphi_2(q_3) + \varphi_1(q_1)\varphi_2(q_2)\varphi_1(q_3) + \varphi_2(q_1)\varphi_1(q_2)\varphi_1(q_3)]$$

1.当初末态相同时

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle &= 3 \langle \psi | f(q_1) | \psi \rangle \\ &= \langle \varphi_1(q_1) | f(q_1) | \varphi_1(q_1) \rangle \langle \varphi_1(q_2)\varphi_2(q_3) | \varphi_1(q_2)\varphi_2(q_3) \rangle \\ &\quad + \langle \varphi_1(q_1) | f(q_1) | \varphi_1(q_1) \rangle \langle \varphi_2(q_2)\varphi_1(q_3) | \varphi_2(q_2)\varphi_1(q_3) \rangle \\ &\quad + \langle \varphi_2(q_1) | f(q_1) | \varphi_2(q_1) \rangle \langle \varphi_1(q_2)\varphi_1(q_3) | \varphi_1(q_2)\varphi_1(q_3) \rangle = 2f_{11} + f_{22} \\ &= \sum_k n_k f_{kk} \end{aligned}$$

展开式的其余6项由于波函数正交均为0

因此初末态相同时，与每个单粒子态上数量有关

2.当初末态不同时，设末态为 $|1, 2, 0\rangle$

$$\psi'(q_1, q_2, q_3)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3}} [\varphi_1(q_1)\varphi_2(q_2)\varphi_2(q_3) + \varphi_2(q_1)\varphi_1(q_2)\varphi_2(q_3) + \varphi_2(q_1)\varphi_2(q_2)\varphi_1(q_3)]$$

$$\langle \psi' | \hat{F} | \psi \rangle = 3 \langle \psi | f(q_1) | \psi \rangle$$

$$= \langle \varphi_2(q_1) | f(q_1) | \varphi_1(q_1) \rangle \langle \varphi_2(q_2)\varphi_1(q_3) | \varphi_2(q_2)\varphi_1(q_3) \rangle +$$

$$\langle \varphi_2(q_1) | f(q_1) | \varphi_1(q_1) \rangle \langle \varphi_1(q_2)\varphi_2(q_3) | \varphi_1(q_2)\varphi_2(q_3) \rangle = 2f_{21} = \sqrt{(n_j + 1)n_k} f_{jk}$$

展开式的其余7项由于波函数正交均为0

因此，初末态不同时，只和初末态及其粒子数分布有关

$$\hat{F} = \sum_{\alpha, \beta} f_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}$$

ii. 粒子数表象中

粒子数表象中，计算 $\hat{F}$ 的各矩阵元有

$$\langle \dots, n_{\alpha}, n_{\beta}, \dots | \hat{F} | \dots, n_{\alpha}', n_{\beta}', \dots \rangle = \sum_{\alpha, \beta} f_{\alpha\beta} \langle \dots, n_{\alpha}, n_{\beta}, \dots | a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} | \dots, n_{\alpha}', n_{\beta}', \dots \rangle$$

(1) 初末态相同时

$$\begin{aligned} \langle \dots, n_{\alpha}, n_{\beta}, \dots | \hat{F} | \dots, n_{\alpha}, n_{\beta}, \dots \rangle &= \sum_{\alpha} f_{\alpha\alpha} \langle \dots, n_{\alpha}, n_{\beta}, \dots | a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} | \dots, n_{\alpha}, n_{\beta}, \dots \rangle \\ &= \sum_{\alpha} n_{\alpha} f_{\alpha\alpha} \end{aligned}$$

(2) 初末态不同时 ($j < k$)

$$\begin{aligned} & \langle \dots, n_j + 1, n_k - 1, \dots | \hat{F} | \dots, n_j, n_k, \dots \rangle \\ &= \sum_{\alpha, \beta} f_{\alpha\beta} \langle \dots, n_j + 1, n_k - 1, \dots | a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} | \dots, n_j, n_k, \dots \rangle \\ &= \sum_{\alpha, \beta} \sqrt{(n_j + 1)n_k} \delta_{\alpha j} \delta_{\beta k} f_{\alpha\beta} \\ &= \sqrt{(n_j + 1)n_k} f_{jk} \end{aligned}$$

由上，坐标表象下的结果与粒子数表象下的结果是一致的

说明或验证粒子数表象下单体算符形式是正确的

以初态为 $|2, 1, 0\rangle$ 为例

$$\hat{F} = \sum_{\alpha, \beta} f_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}$$

1. 当初末态相同时

$$\begin{aligned}\langle 2, 1, 0 | \hat{F} | 2, 1, 0 \rangle &= \sum_{\alpha} f_{\alpha\alpha} \langle 2, 1, 0 | a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} | 2, 1, 0 \rangle \\ &= f_{11} \langle 2, 1, 0 | a_1^{\dagger} a_1 | 2, 1, 0 \rangle + f_{22} \langle 2, 1, 0 | a_2^{\dagger} a_2 | 2, 1, 0 \rangle = 2f_{11} + f_{22} \\ &= \sum_k n_k f_{kk}\end{aligned}$$

因此初末态相同时，与每个单粒子态上数量有关

2. 当初末态不同时，设末态为 $|1, 2, 0\rangle$

$$\begin{aligned}\langle 1, 2, 0 | \hat{F} | 2, 1, 0 \rangle &= f_{21} \langle 1, 2, 0 | a_2^{\dagger} a_1 | 2, 1, 0 \rangle \\ &= \sqrt{2} f_{21} \langle 1, 2, 0 | a_2^{\dagger} | 1, 1, 0 \rangle = 2f_{21} = \sqrt{(n_j+1)n_k} f_{jk}\end{aligned}$$

因此，初末态不同时，只和初末态及其粒子数分布有关

- 玻色子体系的二体算符

在坐标表象中，二体算符为

$$\hat{G} = \sum_{i,j} \hat{g}(q_i, q_j)$$

其中 $\hat{g}(q_i, q_j) = \hat{g}(q_j, q_i)$ 。对于二体算符来说，初末态最多差两个单粒子数

在粒子数表象中，二体算符的形式为

$$\hat{G} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \alpha', \beta'} g_{\alpha' \beta' \alpha \beta} a_{\alpha'}^{\dagger} a_{\beta'}^{\dagger} a_{\beta} a_{\alpha}$$

其中 $g_{\alpha' \beta' \alpha \beta} = \langle \varphi_{\alpha'}(q_1) \varphi_{\beta'}(q_2) | \hat{g}(q_1, q_2) | \varphi_{\alpha}(q_1) \varphi_{\beta}(q_2) \rangle$ 。可以与单体算符使用类似的方法验证，但是比较繁杂，这里就省略

（可参考田光善的《高等量子力学讲义》或曾谨言的《量子力学 II》）

2. 费米子体系单体算符

分析：费米子体系中的单体算符 $\hat{F}$ 和二体算符 $\hat{G}$ 与玻色子体系具有**相同**的形式。我们同样来验证它在费米子体系中的正确性

i. 坐标表象中

$$\hat{F} = \sum_{i=1}^N \hat{f}(q_i)$$

计算 $\hat{F}$ 的各矩阵元，由于每个粒子地位均等，有

$$\langle \psi_{\alpha\beta\gamma\dots} | \hat{F} | \psi_{\alpha'\beta'\gamma'\dots} \rangle = N \langle \psi_{\alpha\beta\gamma\dots} | \hat{f}(q_1) | \psi_{\alpha'\beta'\gamma'\dots} \rangle$$

(1) 初末态相同时，设 q_1 粒子在 φ_k 态， $f_{kk} = \langle \varphi_k(q_1) | \hat{f}(q_1) | \varphi_k(q_1) \rangle$

其余 $N-1$ 个粒子有 $(N-1)!$ 种排布方式，可得

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\alpha\beta\gamma\dots} | \hat{F} | \psi_{\alpha\beta\gamma\dots} \rangle &= N \langle \psi_{\alpha\beta\gamma\dots} | \hat{f}(q_1) | \psi_{\alpha\beta\gamma\dots} \rangle \\ &= N \sqrt{\frac{1}{N!}} \sqrt{\frac{1}{N!}} \sum_k (N-1)! n_k f_{kk} = \sum_k n_k f_{kk} \end{aligned}$$

其中 $n_k = 1$ 的态为占据态， $n_k = 0$ 的态为未占据态

(2) 初末态不同时，设占据态变化的两个态为 $\varphi_j, \varphi_k (j < k, \text{从} k \text{到} j)$ 。对应的单粒子算符矩阵元为 f_{jk} ，其余 $N-1$ 个粒子的占据态不变，所以矩阵元可以写成

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\dots 1_j \dots 0_k \dots} | \hat{F} | \psi_{\dots 0_j \dots 1_k \dots} \rangle &= N \langle \psi_{\dots 1_j \dots 0_k \dots} | \hat{f}(q_1) | \psi_{\dots 0_j \dots 1_k \dots} \rangle \\ &= N \sqrt{\frac{1}{N!}} \sqrt{\frac{1}{N!}} \sum_{P, P'} \delta_P \delta_{P'} \langle \dots \varphi_j(q_1) \dots | \hat{f}(q_1) | \dots \varphi_k(q_1) \dots \rangle \end{aligned}$$

其中 $\delta_P, \delta_{P'}$ 分别是 $\dots \varphi_j(q_1) \dots$ 和 $\dots \varphi_k(q_1) \dots$ 在交换反对称波函数中的正负号，也等于从 $\varphi_1(q_1) \dots$ 通过对换得到 $\dots \varphi_j(q_1) \dots$ 和 $\dots \varphi_k(q_1) \dots$ 的次数，即：

$$\delta_P = (-1)^{\sum_{i=1}^{j-1} n_i}, \quad \delta_{P'} = (-1)^{\sum_{i=1}^{k-1} n_i}$$

而这种类型的项在Slater行列式中有 $(N-1)!$ 项，可得

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\dots 1_j \dots 0_k \dots} | \hat{F} | \psi_{\dots 0_j \dots 1_k \dots} \rangle &= (-1)^{\sum_{i=j}^{k-1} n_i} f_{jk} \\ &= (-1)^{\sum_{i=j+1}^{k-1} n_i} f_{jk} \end{aligned}$$

(初态中 $n_j = 0$)

ii. 粒子数表象中

$$\hat{F} = \sum_{\alpha, \beta} f_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}$$

(1) 初末态相同时

$$\langle \dots \alpha \beta \dots | \hat{F} | \dots \alpha \beta \dots \rangle = \sum_{\alpha} f_{\alpha\alpha} \langle \dots \alpha \beta \dots | a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} | \dots \alpha \beta \dots \rangle = \sum_{\alpha} n_{\alpha} f_{\alpha\alpha}$$

如果 α 态上有占据, 则 $n_{\alpha} = 1$ 。态上无占据, 则 $n_{\alpha} = 0$

(2) 初末态不同时($j < k$)

$$\begin{aligned} & \langle \dots 0_k \dots 1_j \dots | \hat{F} | \dots 0_j \dots 1_k \dots \rangle \\ &= \sum_{\alpha, \beta} f_{\alpha\beta} \langle \dots 0_k \dots 1_j \dots | a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} | \dots 0_j \dots 1_k \dots \rangle \\ &= \sum_{\alpha, \beta} (-1)^{\sum_{i=1}^{j-1} n_i} (-1)^{\sum_{i=1}^{k-1} n_i} \delta_{\alpha j} \delta_{\beta k} f_{\alpha\beta} \\ &= (-1)^{\sum_{i=j+1}^{k-1} n_i} f_{jk} \end{aligned}$$

这与坐标表象中的结果也是相同的

- 费米子体系的二体算符

在坐标表象中，二体算符为

$$\hat{G} = \sum_{i,j} \hat{g}(q_i, q_j)$$

其中 $\hat{g}(q_i, q_j) = \hat{g}(q_j, q_i)$ 。对于二体算符来说，初末态最多差两个单粒子数

在粒子数表象中，二体算符的形式为

$$\hat{G} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \alpha', \beta'} g_{\alpha' \beta' \alpha \beta} a_{\alpha'}^{\dagger} a_{\beta'}^{\dagger} a_{\beta} a_{\alpha}$$

其中 $g_{\alpha' \beta' \alpha \beta} = \langle \varphi_{\alpha'}(q_1) \varphi_{\beta'}(q_2) | \hat{g}(q_1, q_2) | \varphi_{\alpha}(q_1) \varphi_{\beta}(q_2) \rangle$ 。可以与单体算符使用类似的方法验证，这里就省略了

四、二次量子化说法的由来

单粒子 $\xrightarrow{\text{一次量子化}}$ 波函数（坐标表象）

（坐标表象）多个全同粒子 $\xrightarrow{\text{二次量子化}}$

粒子数的产生湮灭算符（粒子数表象）

五、思考题和作业

1. 全同粒子体系的定义；波函数的交换对称性；玻色子、费米子的定义；泡利不相容原理
2. 粒子数表象中，玻色子体系与费米子体系的量子态（波函数）如何标记？
3. 玻色子体系与费米子体系中 $a, a^\dagger$ 的对易关系及其它交换关系如何？
4. 玻色体系粒子数表象（Fock态）的内容
5. 玻色子体系与费米子体系中单体算符的表达式及如何验证？二体算符的表达式为何及如何验证？
6. 二次量子化说法的由来？

第二章作业

讨论三个全同玻色子、费米子体系的波函数，在此基础上，验证玻色子、费米子体系在粒子数表象下单体（和两体）算符的正确性。（两体算符部分选做）

要求：

1. 阐述问题（已知条件和假设由自己构造）
2. 解决问题的思路（写清楚步骤和想法）
3. 具体的公式推导（支持上面的思路）
4. 结论和讨论（自己的看法、理解及前沿发展）

（下周之内交，最好课上交，可以交电子作业，亲自写）

