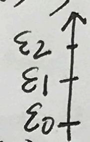
第22讲.

这部分的内容通常叫"二次量子化". 但这是个错误的名称: 并没有"二次"量子化, 这只是处理多体问题的一种表示方法.

我们熟悉单粒子问题: 给定H, $H|k\rangle=\varepsilon_k|k\rangle$, k是一组好量子数. $|k\rangle$构成完备性基矢.



考虑两个粒子, 无相互作用. $H=H(1)+H(2)$, 不可分辨

那么能量本征态为 $|k_1,k_2\rangle_\pm=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|k_1\rangle|k_2\rangle\pm|k_2\rangle|k_1\rangle\right]$

- "±"分别对应Bosons和Fermions: 对称与反对称态.

对应的波函数为 $\psi_{B/F}(x_1,x_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\langle x_1|k_1\rangle\langle x_2|k_2\rangle\pm\langle x_1|k_2\rangle\langle x_2|k_1\rangle\right]$

$$=\langle x_1|\otimes\langle x_2|\cdot|k_1,k_2\rangle_\pm$$

- 这是全同粒子不可分辨的结果.

对于 $c_1|k_1\rangle|k_2\rangle+c_2|k_2\rangle|k_1\rangle$, 任意 c_1、c_2 都给出"一个粒子 k_1, 另一个 k_2"的测量结果。但是不同的 c_1,c_2 对应不同的"态矢", 这称为简并.

引入交换算符 P_{12}: $P_{12}\left(c_1|k_1\rangle|k_2\rangle+c_2|k_2\rangle|k_1\rangle\right)$

$$=c_1|k_2\rangle|k_1\rangle+c_2|k_1\rangle|k_2\rangle$$

由于 $P_{12}\cdot P_{12}=\mathbb{1}$, 又 $P_{12}\cdot P_{12}\left(c_1|k_1\rangle|k_2\rangle+c_2|k_2\rangle|k_1\rangle\right)$

$$=P_{12}\cdot\left(c_1|k_2\rangle|k_1\rangle+c_2|k_1\rangle|k_2\rangle\right)\longrightarrow(1)$$

"由于交换后的态与原态相差常复数"c":

$$=P_{12}\cdot c\left(c_1|k_1\rangle|k_2\rangle+c_2|k_2\rangle|k_1\rangle\right)\longrightarrow(2)$$

$$=c^2\left(c_1|k_1\rangle|k_2\rangle+c_2|k_2\rangle|k_1\rangle\right)$$

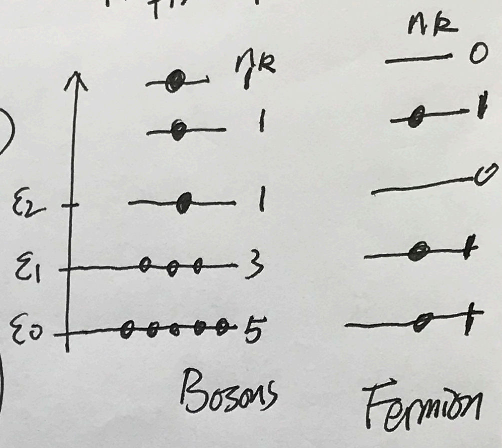
$\therefore c=\pm1$. 对应Boson与Fermion.

由(2) $\Rightarrow$ $c_1=\pm c_2$, 归一化 $\Rightarrow$ $c_1=\pm c_2=\frac{1}{\sqrt{2}}$.

$$P_{12}|k_1,k_2\rangle=\pm|k_1,k_2\rangle$$

推广到N个粒子： $\xi=\pm 1$ 对应 Boson/Fermion；

$$|k_1,k_2,\dots,k_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!\prod_{k=0}^{\infty} n_k!}} \sum_P \xi^{(1-\mathrm{sgn}P)/2} |k_{P_1}\rangle|k_{P_2}\rangle\cdots|k_{P_N}\rangle$$



- n_k 是态 k 上的粒子数.（对 Fermion, $n_k\le 1$）
- $\sum_P$ 求和是对 $N!$ 个置换 (permutation)

$$\begin{pmatrix} k_1, & k_2, & \dots, & k_N \\ k_{P_1}, & k_{P_2}, & \dots, & k_{P_N}\end{pmatrix} \text{或} \begin{pmatrix}1, & 2, & \dots & N\\ P_1, & P_2, & \dots & P_N\end{pmatrix}$$

$\mathrm{sgn}P=1$，如果置换是偶的 ← 偶数次交换使 P 回到 $(1\cdots N)$

$\mathrm{sgn}P=-1$，…… 奇的.

例. $\begin{pmatrix}1&2&3\\2&1&3\end{pmatrix}$ 奇，$\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix}$ 偶. 共6个置换.

- 系数 $\frac{1}{\sqrt{N!\prod_{k=0} n_k!}}$ 保证归一化. 例. $N=3$, $k_1=k_2$. Bosons.

$$|k_1,k_1,k_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{6\cdot 2}}\left(2|k_1k_1k_3\rangle+2|k_1k_3k_1\rangle+2|k_3k_1k_1\rangle\right)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{3}}\left(|k_1k_1k_3\rangle+|k_1k_3k_1\rangle+|k_3k_1k_1\rangle\right)$$

- 对于Fermion. $|k_1k_2\cdots k_N\rangle$ 记是 Slater 行列式. $\begin{pmatrix}|k_1\rangle & |k_2\rangle\\ |k_1\rangle & |k_2\rangle\end{pmatrix}$
- 一般按某种约定排列态 k_i：例. 设 k_i 是粒子位置 x_i，一维系统约定 $x_1\le x_2\le x_3\cdots\le x_N$.

以上这种作法不方便：比如1.算内积 $(N!)^2$ 项. 2. 实际系统 N 并不固定，$\sim 10^{23}$. 巨正则系综更方便：让 N 涨落.

3. 怎么回答：在 (x_1,t_1) 注入一个粒子，在 (x_2,t_2) 湮灭它的几率幅？

§ 二次量子化方法.

• 占据数表示与 Fock 空间.

把 $|1,1,1,1,2,2,3,3,3,5,5\rangle$ 写成 $|4,2,3,0,2,\cdots\rangle$

第 i 个位置上的数字表示占据第 i 个态的粒子数，这就够了!

在 $\mathcal{F}^N$ 空间中基矢为: $|n_1,n_2,\cdots\rangle$, $\sum_i n_i = N$.

任意态 $|\psi\rangle$ 可写成: $|\psi\rangle = \sum_{\{n_i\},\sum n_i=N} C_{\{n_i\}} |n_1,n_2,\cdots\rangle$

$\{n_i\}$ 表示 $n_1,n_2,n_3,\cdots$.

定义 Fock space: $\mathcal{F} \equiv \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{F}^N$, 直和.

包含一个特殊的空间: $\mathcal{F}^0$, 真空 (vacuum space), 它是一维的. 没有粒子, 对应单独一个归一化态矢 $|0\rangle$.

在 $\mathcal{F}$ 空间中, 态 $|\psi\rangle = \sum_{n_1,n_2,\cdots} C_{\{n_i\}} |n_1,n_2,\cdots\rangle$, 无须写条件 $\sum_i n_i = N$.

• 怎样避开复杂的对称化/反对称化操作?

定义 $a_i^+ |n_1,n_2,\cdots,n_i,\cdots\rangle \equiv (n_i+1)^{\frac{1}{2}} \zeta^{s_i} |n_1,n_2,\cdots n_i+1,\cdots\rangle$

其中 $s_i = \sum_{j=1}^{i-1} n_j$, 费米子: $n_i+1 \equiv \mathrm{mod}(n_i+1, 2) \begin{cases} n_i=0\text{时}, 1 \\ n_i=1\text{时}, 0. \end{cases}$

$\mathcal{F}$ 中所有基矢都可以由 a_i^+ 对 $|0\rangle$ 作用(不停地)生成!

$$|n_1,n_2,\cdots\rangle = \prod_i \frac{1}{(n_i!)^{\frac{1}{2}}} (a_i^+)^{n_i} |0\rangle$$

a^+ 称为产生算符. $\mathcal{F}^1 \xleftarrow{a^+} \mathcal{F}^0$, 上述避免了复杂的置换

creation op.

考虑 a_i^+, a_j^+，其中 $i\neq j$. 由 a_i^+ 的定义易证

$$(a_i^+a_j^+ - \zeta a_j^+ a_i^+)|n_1,n_2,\cdots\rangle = 0 .$$

即: $[a_i^+, a_j^+]_\zeta = 0$. ($[\,,\,]_{\zeta=-1}$ 也写作 $\{\,,\,\}$, 反对易关系) $\equiv [\,,\,]_+$

如果 $i=j$, Fermion: $[a_i^+,a_i^+]_{\zeta=-1} = 2{a_i^+}^2=0$; Boson: $[a_i^+,a_i^+]=0$

$$\boxed{\therefore\ \forall i,j:\ [a_i^+,a_j^+]_\zeta=0 .}$$

- 定义 $a_i \equiv (a_i^+)^+$.

$$\langle n_1,\cdots,n_i,\cdots| a_i^+ |n_1',\cdots,n_i',\cdots\rangle = (n_i'+1)^{\frac{1}{2}}\zeta^{s_i'}\delta_{n_1n_1'}\cdots\delta_{n_i,n_i'+1}\cdots$$

$$\Rightarrow \langle n_1',\cdots,n_i',\cdots|a_i|n_1,\cdots,n_i\cdots\rangle^* = n_i^{\frac{1}{2}}\zeta^{s_i}\delta_{n_1'n_1}\cdots\delta_{n_i',n_i-1}\cdots$$

(用了 n_i' 与 n_i 的关系 $\delta_{n_i,n_i'+1}$)

$$\Rightarrow \boxed{a_i|n_1\cdots n_i\cdots\rangle = n_i^{\frac{1}{2}}\zeta^{s_i}|n_1,\cdots,n_i-1,\cdots\rangle}$$

我们看到 a_i 使粒子数减少一个:
$$\begin{tikzcd} \mathcal{F}^N \arrow[r, bend left, "a"] & \mathcal{F}^{N-1} \arrow[l, bend left, "a^+"] \end{tikzcd}$$

所以 a_i 称为消灭算符 annihilation operator

~~特别地~~ 特别地: $\boxed{a_i|0\rangle = 0}$ ☆ $|0\rangle$ 是个态, 0 是个数.

$$\boxed{\forall i,j:\quad [a_i,a_j]_\zeta=0} \qquad \boxed{[a_i,a_j^+]_\zeta=\delta_{ij}}$$ ←直接算出