算符二次量子化形式的一种导出方式

任政学[1,2]，孙保元[1]
(1. 兰州大学 核科学与技术学院，甘肃 兰州 730000; 2. 北京大学 物理学院，北京 100871)

摘要: 首先通过单体算符在粒子数表象下的形式得到单粒子跃迁算符(定义为粒子产生湮没算符的乘积，即 $a_i^+a_j$) 的具体展开式，同时给出它与产生湮没算符的对易关系，然后以此为基础，在不区分全同粒子系统的统计学性质的情况下，简洁地得到二体算符和任意 n 体算符的二次量子化形式.

关键词: 二次量子化; 粒子数表象; 力学量算符; 跃迁算符
中图分类号: O 413.1　　文献标识码: A　　文章编号: 1000-0712(2015)01-0009-03

初等量子力学主要处理单体问题. 对于由全同粒子组成的微观粒子体系，若使用初等量子力学方法，对其量子态在坐标表象下展开表示，那么处理问题的过程是相当繁琐的，甚至是无法解决的. 在高等量子力学课程中，一般引入二次量子化方法来简化此类问题的处理. 二次量子化的关键首先是粒子数表象的引入，其次是力学量算符用粒子产生算符和湮没算符表示. 通常碰到的力学量是单体或二体算符. 在很多教材中[1,2]，力学量算符这种二次量子化的形式，一般是直接给出，再对其形式的合理性进行间接验证，如比较算符矩阵元在坐标表象与粒子数表象下的计算结果. 对于任意 n 体算符的二次量子化形式基本也只是作为推论直接给出，由于形式繁琐往往缺乏验证. 本文尝试通过单体算符的二次量子化形式，得到单粒子跃迁算符的展开表达式，同时给出它与产生湮没算符的对易关系，进而以此为基础，在不区分全同粒子系统的统计学性质的情况下，简洁地导出二体以及 n 体算符的二次量子化形式.

1　单粒子跃迁算符表达式

考虑一个由 N 个全同粒子组成的微观粒子体系，先对粒子进行编号，即用 $\alpha(\alpha=1,2,\cdots,N)$ 来标记. 对于第 α 个粒子，假定其处于单粒子态 $|k>$ 上(完备且正交归一)，则可用 $|k>_\alpha$ 来表示. 设单粒子算符为 $\hat{f}(\alpha)$，可将其在单粒子态 $|k>_\alpha$ 下展开:

$$\hat{f}(\alpha) = \sum_{i,j} |i>_\alpha <i|_\alpha \hat{f}(\alpha)|j>_\alpha <j|_\alpha = \sum_{i,j} f_{ij}|i>_\alpha <j|_\alpha \tag{1}$$

式(1)中 $f_{ij}\equiv <i|_\alpha \hat{f}(\alpha)|j>_\alpha$，将下标 α 去掉是因为 $<i|_\alpha \hat{f}(\alpha)|j>_\alpha$ 的值与具体粒子的编号选择无关. 则相应全同粒子的单体算符表示为

$$\hat{F} = \sum_{\alpha=1}^{N}\hat{f}(\alpha) = \sum_{i,j} f_{ij}\sum_{\alpha=1}^{N}|i>_\alpha <j|_\alpha \tag{2}$$

另一方面，在粒子数表象中，单体算符可用粒子产生算符和湮没算符来表示[1,3]:

$$\hat{F} = \sum_{i,j} f_{ij}a_i^+a_j \tag{3}$$

定义单粒子跃迁算符为 $\hat{S}_{ij}=a_i^+a_j$，其作用使处于 $|j>$ 态的一个粒子跃迁到 $|i>$ 态上. 将式(2)与式(3)相比较，可以发现:

$$\hat{S}_{ij} = a_i^+a_j = \sum_{\alpha=1}^{N}|i>_\alpha <j|_\alpha \tag{4}$$

此即单粒子跃迁算符的具体展开表达式. 由于以上推导过程并未明确规定所研究全同粒子系的统计性质，因此式(4)对于玻色子体系和费米子体系均适用，其严格证明在文献[4]中给出. 利用玻色子体系或者费米子体系的产生湮没算符的对易关系，均可以得到跃迁算符的如下对易式:

$$[a_k,\hat{S}_{ij}] = \delta_{ki}a_j,\quad [\hat{S}_{ij},a_k^+] = a_i^+\delta_{jk} \tag{5}$$

下面将利用式(4)与式(5)结论导出全同粒子系二体算符以及 n 体算符的二次量子化形式.

2　二体算符的推导

全同粒子系的二体算符的形式为

收稿日期: 2014-05-29; 修回日期: 2014-09-18
基金项目: 国家自然科学基金项目(11205075)资助; 高等学校博士学科点专项科研基金新教师类资助课题(20120211120002)
作者简介: 任政学(1992—)，男，河南省新乡市人，兰州大学核科学与技术学院 2010 级本科生，北京大学物理学院 2014 级博士研究生.
通讯作者: 孙保元; Email: sunby@lzu.edu.cn

$$\hat{G} = \sum_{\alpha<\beta} \hat{g}(\alpha,\beta) = \frac{1}{2}\sum_{\alpha=\beta} \hat{g}(\alpha,\beta) \quad (6)$$

类似地,可将其在单粒子态下展开:

$$\hat{G} = \frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l} g_{ij,kl} \sum_{\alpha\neq\beta} |i>_\alpha |j>_\beta <k|_\beta <l|_\alpha = \frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l} g_{ij,kl} \sum_{\alpha\neq\beta} |i>_\alpha <l|_\alpha |j>_\beta <k|_\beta \quad (7)$$

其中 $g_{ij,kl} \equiv <i|_\alpha <j|_\beta \hat{g}(\alpha,\beta) |k>_\beta |l>_\alpha$,同样其结果与具体粒子的编号选择无关.另外,上式中可以将 $<l|_\alpha$ 进行移动是由于第 α 个粒子与第 β 个粒子($\alpha\neq\beta$)属于不同的自由度.通过简单的数学技巧[4],还可以看出

$$\sum_{\alpha\neq\beta} |i>_\alpha <l|_\alpha |j>_\beta <k|_\beta = \sum_{\alpha,\beta} (1-\delta_{\alpha\beta}) |i>_\alpha <l|_\alpha |j>_\beta <k|_\beta = \sum_{\alpha,\beta} |i>_\alpha <l|_\alpha |j>_\beta <k|_\beta - \sum_{\alpha} |i>_\alpha \delta_{lj} <k|_\alpha \quad (8)$$

进而利用单粒子跃迁算符表达式(4),得到

$$\sum_{\alpha\neq\beta} |i>_\alpha <l|_\alpha |j>_\beta <k|_\beta = a_i^+ a_l \hat{S}_{jk} - a_i^+ a_k \delta_{lj} \quad (9)$$

利用表达式(5)来处理 $a_k\delta_{lj}$,式(9)可化为

$$\sum_{\alpha\neq\beta} |i>_\alpha |j>_\beta <k|_\beta <l|_\alpha = a_i^+ \hat{S}_{jk} a_i = a_i^+ a_j^+ a_k a_l \quad (10)$$

以上推导过程对所研究全同粒子系的统计性质没有限制,因此无论对于玻色子或费米子组成的全同粒子系,二体算符的二次量子化形式都已证明可写为

$$\hat{G} = \frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l} g_{ij,kl} a_i^+ a_j^+ a_k a_l \quad (11)$$

3 任意 n 体算符的推导

推而广之,还可以利用式(4)和式(5)证明多体算符的二次量子化形式.设 n 体算符为[3]

$$\hat{W} = \sum_{\alpha_1<\alpha_2<\cdots<\alpha_n} \hat{w}(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n) = \frac{1}{n!}\sum_{\{\alpha_1,\cdots,\alpha_n\}} \hat{w}(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n) \quad (12)$$

其中$\Sigma_{\{\alpha_1,\cdots,\alpha_n\}}$表示对 $\alpha_1,\cdots,\alpha_n$ 求和但要求两两不相等.类似于单体和二体算符的情形,也可将上式在单粒子态下展开为

$$\hat{W} = \frac{1}{n!}\sum_{\substack{i_1,\cdots,i_n\\ j_1,\cdots,j_n}} w_{i_1\cdots i_n j_n\cdots j_1} \sum_{\{\alpha_1,\cdots,\alpha_n\}} |i_1>_{\alpha_1}\cdots |i_n>_{\alpha_n} <j_n|_{\alpha_n}\cdots <j_1|_{\alpha_1} \quad (13)$$

其中 $w_{i_1\cdots i_n j_n\cdots j_1}$ 为 $<i_1|_{\alpha_1}\cdots <i_n|_{\alpha_n}\hat{w}(\alpha_2,\cdots,\alpha_n)|f_n>_{\alpha_n}\cdots|f_1>_{\alpha_1}$ 的简写.与单体和二体算符情况相同,其结果与具体粒子的编号选择无关.通过比较单体算符时的式(4)和二体算符时的式(10),可以猜想 n 体算符情形下应有关系:

$$\sum_{\{\alpha_1,\cdots,\alpha_n\}} |i_1>_{\alpha_1}\cdots|i_n>_{\alpha_n} <j_n|_{\alpha_n}\cdots <j_1|_{\alpha_1} = a_{i_1}^+\cdots a_{i_n}^+ a_{j_n}\cdots a_{j_1} \quad (14)$$

下面利用数学归纳法证明式(14).

1)当 $n=1,2$ 时,即单体算符和二体算符的情形,根据前面分析可知结论成立.

2)假设当 $n=k$ 时,式(14)成立,即有

$$\sum_{\{\alpha_1,\cdots,\alpha_n\}} |i_1>_{\alpha_1}\cdots|i_k>_{\alpha_k} <j_k|_{\alpha_k}\cdots <j_1|_{\alpha_1} = a_{i_1}^+\cdots a_{i_k}^+ a_{j_k}\cdots a_{j_1} \quad (15)$$

则当 $n=k+1$ 时,可以得到

$$\begin{aligned}&\sum_{\{\alpha_1,\cdots,\alpha_{k+1}\}} |i_1>_{\alpha_1}\cdots|i_k>_{\alpha_k}|i_{k+1}>_{\alpha_{k+1}} <j_{k+1}|_{\alpha_{k+1}} <j_k|_{\alpha_k}\cdots <j_1|_{\alpha_1} = \\ &\sum_{\{\alpha_1,\cdots,\alpha_{k+1}\}} |i_1>_{\alpha_1}\cdots|i_k>_{\alpha_k} <j_k|_{\alpha_k}\cdots <j_1|_{\alpha_1} |i_{k+1}>_{\alpha_{k+1}} <j_{k+1}|_{\alpha_{k+1}} = \\ &\sum_{\{\alpha_1,\cdots,\alpha_k\}} |i_1>_{\alpha_1}\cdots|i_k>_{\alpha_k} <j_k|_{\alpha_k}\cdots <j_1|_{\alpha_1} \sum_{\alpha_{k+1}} |i_{k+1}>_{\alpha_{k+1}} <j_{k+1}|_{\alpha_{k+1}} - \\ &\sum_{\{\alpha_1,\cdots,\alpha_k\}} |i_1>_{\alpha_1}\cdots|i_m>_{\alpha_m}\cdots|i_k>_{\alpha_k} <j_k|_{a_k}\cdots <j_m|_{\alpha_m}\cdots <j_1|_{\alpha_1} \sum_{m=1}^{k} |i_{k+1}>_{\alpha_m} <j_{k+1}|_{\alpha_m}\end{aligned} \quad (16)$$

式(16)中$\Sigma_{\alpha_{k+1}}$表示对全部 $k+1$ 个粒子求和.利用式(4)和式(15),可以将其化为

$$\sum_{\{\alpha_1,\cdots,\alpha_k\}} |i_1>_{\alpha_1}\cdots|i_k>_{\alpha_k}|j_k>_{\alpha_k}\cdots <j_1|_{\alpha_1} \sum_{\alpha_{k+1}} |i_{k+1}>_{\alpha_{k+1}} <j_{k+1}|_{\alpha_{k+1}} = a_{i_1}^+\cdots a_{i_k}^+ a_{j_k}\cdots a_{j_1} \hat{S}_{i_{k+1}j_{k+1}} \quad (17)$$

对于式(16)第二项,先交换求和顺序并移项,可将其化为

$$\begin{aligned}&\sum_{m=1}^{k}\sum_{\{\alpha_1,\cdots,\alpha_k\}} |i_1>_{\alpha_1}\cdots|i_m>_{\alpha_m}\cdots|i_k>_{\alpha_k} <j_k>_{\alpha_k}\cdots <j_m|_{\alpha_m}\cdots <j_1|_{\alpha_1} |i_{k+1}>_{\alpha_m} <j_{k+1}|_{\alpha_m} = \\ &\sum_{m=1}^{k}\sum_{\{\alpha_1,\cdots,\alpha_k\}} |i_1>_{\alpha_1}\cdots|i_m>_{\alpha_m}\cdots|i_k>_{\alpha_k} <j_k|_{\alpha_k}\cdots <j_m|_{\alpha_m}|i_{k+1}>_{\alpha_m} <j_{k+1}|_{\alpha_m}\cdots <j_1|_{\alpha_1}\end{aligned} \quad (18)$$

利用正交关系 $<j_m|_{\alpha_m}|i_{k+1}>_{\alpha_m} = \delta_{j_m i_{k+1}}$ 并结合式(15),上式进一步化为

$$\begin{aligned}&\sum_{m=1}^{k}\delta_{j_m i_{k+1}}\sum_{(\alpha_1,\cdots,\alpha_k)} |i_1>_{\alpha_1}\cdots|i_m>_{\alpha_m}\cdots|i_k>_{\alpha_k} <j_k|_{\alpha_k}\cdots <j_{k+1}|_{\alpha_m}\cdots <j_1|_{\alpha_1} = \\ &\sum_{m=1}^{k}\delta_{j_m i_{k+1}} a_{i_1}^+\cdots a_{i_k}^+ a_{j_k}\cdots a_{j_{m+1}} a_{j_{k+1}} a_{j_{m-1}}\cdots a_{j_1} =\end{aligned}$$

$$\sum_{m=1}^{k} a_{i_1}^{+}\cdots a_{i_k}^{+}a_{j_k}\cdots a_{j_{m+1}}(\delta_{j_m i_{k+1}}a_{j_{k+1}})a_{j_{m-1}}\cdots a_{j_1}=$$

$$\sum_{m=1}^{k} a_{i_1}^{+}\cdots a_{i_k}^{+}a_{j_k}\cdots a_{j_{m-1}}(a_{j_m}\hat{S}_{i_{k+1}j_{k+1}}-\hat{S}_{i_{k+1}j_{k+1}}a_{j_m})a_{j_{m-1}}\cdots a_{j_1} \tag{19}$$

上式最后一步利用了式(5)的结论. 方便起见，可以令

$$A(m)\equiv a_{i_1}^{+}\cdots a_{i_k}^{+}a_{j_k}\cdots a_{j_m}\hat{S}_{i_{k+1}j_{k+1}}a_{j_{m-1}}\cdots a_{j_1} \tag{20}$$

它表示在表达式 $a_{i_1}^{+}\cdots a_{i_k}^{+}a_{j_k}\cdots a_{j_m}a_{j_{m-1}}\cdots a_{j_1}$ 中 a_{j_m} 之后，且 $a_{j_{m-1}}$ 之前插入跃迁算符 $\hat{S}_{i_{k+1}j_{k+1}}$. 则式(19)可以简化为

$$\sum_{m=1}^{k}[A(m)-A(m+1)]=[A(1)-A(2)]+[A(2)-A(3)]+\cdots+[A(k)-A(k+1)]=A(1)-A(k+1) \tag{21}$$

而利用式(17)，式(16)中的一项可以简写为 $A(1)$. 最终可得当 $n=k+1$ 时，有

$$\sum_{\{\alpha_1,\cdots,\alpha_{k+1}\}}|i_1>_{\alpha_1}\cdots|i_k>_{\alpha_k}|i_{k+1}>_{\alpha_{k+1}}<j_{k+1}|_{\alpha_{k+1}}<j_k|_{\alpha_k}\cdots<j_1|_{\alpha_1}=A(1)-[A(1)-A(k+1)]=A(k+1)=a_{i_1}^{+}\cdots a_{i_k}^{+}a_{i_{k+1}}^{+}a_{j_{k+1}}a_{j_k}\cdots a_{j_1} \tag{22}$$

这说明当 $n=k+1$ 时猜测成立. 由此证明式(14)结论对于任意 $n\geqslant 1$ 均成立，最终推出 n 体算符的二次量子化形式：

$$\hat{W}=\frac{1}{n!}\sum_{\substack{i_1,\cdots,i_n\\ j_1,\cdots,j_n}} w_{i_1\cdots i_n j_n\cdots j_1}a_{i_1}^{+}\cdots a_{i_n}^{+}a_{j_n}\cdots a_{j_1} \tag{23}$$

4　结论

通过以上讨论，相对简单地导出了具有任意统计学性质的全同粒子系统力学量算符的二次量子化表达式，该方法可用于高等量子力学二次量子化一章的相关教学中，对于缩短教学时间，提高教学效率是一种很好的尝试. 另一方面，本文引入的单粒子跃迁算符及其相关性质与全同粒子系的统计规律无关，对于玻色子体系和费米子体系均相同，这样在推导算符二次量子化形式时不必分类讨论，也使推导变得简洁. 更进一步，单粒子跃迁算符的这种统计无关性还可应用到二维体系中，从而方便开展对任意子(Anyon)及分数量子统计等前沿物理问题的研究.

参考文献：

[1] 曾谨言. 量子力学：卷 II [M]. 4 版. 北京：科学出版社，2007：123-141.

[2] 朗道，栗弗席兹. 量子力学(非相对论理论) [M]. 北京：高等教育出版社，2008：223-230.

[3] 杨泽森. 高等量子力学 [M]. 3 版. 北京：北京大学出版社，2007：107-136.

[4] Franz Schwabl. Advanced Quantum Mechanics [M]. 4th Edition. Berlin：Spinger，2008：3-29.

One method to derive the form of general operators in occupation particle number representation

REN Zheng-xue[1,2], SUN Bao-yuan[1]

(1. School of Nuclear Science and Technology, Lanzhou University, Lanzhou, Gansu 730000, China;
2. School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China)

Abstract: The expansion of single - particle transition operator (defined as the product of creation and annihilation operator, namely $a_i^{+}a_j$ in single - particle state is obtained through the form of single - operator in occupation particle number representation, and the commutation relations for transition operator and creation(annihilation) operator are also given, then based on these conclusions, the form of general two - and n - particle operators in occupation particle number representation can be derived succinctly without distinguishing the statistical property of identical particle system.

Key words: second quantization; occupation particle number representation; general operator; transition operator