第一章、粒子数表象

在本章中，我们将介绍如何更有效地处理全同粒子体系的对称性引起的符号问题。首先，我们引入一些记号。

$ 1.0 置换及其奇偶性

将整数列 $(1, 2, 3, \cdots, N)$ 的任意一个重新排列称为一个置换，记作

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & N \\ P(1) & P(2) & P(3) & \cdots & P(N) \end{pmatrix}. \tag{1}$$

这里， $P(k)$ 为将整数 k 置换后所得的数。例如，在置换

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 1 & 5 & 2 & 3 \end{pmatrix} \tag{2}$$

中，我们有 $P(1) = 4$, $P(2) = 1$, $P(3) = 5$, $P(4) = 2$ 和 $P(5) = 3$ 。显然全部置换的总数等于 N 个数全部排列的个数，即 $N!$ 。

下面的置换值得特别一提。

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & k & \cdots & j & \cdots & N \\ 1 & 2 & \cdots & j & \cdots & k & \cdots & N \end{pmatrix}. \tag{3}$$

这种置换称为对换，记作 (k, j) 。特别是当 $j = k + 1$ 时，对换 $(k, k + 1)$ 称为一个相邻对换或轮换。

两个置换 $\hat{P}_1$ 与 $\hat{P}_2$ 的乘积定义为

$$\begin{aligned} \hat{P}_1\hat{P}_2 &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & N \\ P_1(1) & P_1(2) & \cdots & P_1(N) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & N \\ P_2(1) & P_2(2) & \cdots & P_2(N) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & N \\ P_3(1) & P_3(2) & \cdots & P_3(N) \end{pmatrix} \equiv \hat{P}_3. \end{aligned} \tag{4}$$

它也是一个置换。例如

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 5 & 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 1 & 5 & 2 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 4 & 3 & 5 & 1 \end{pmatrix}. \tag{5}$$

有了置换乘积的定义之后，我们可以证明，任何一个置换都可以写成相邻对换的乘积。例如

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 2 & 4 & 1 \end{pmatrix} = (3,4)(2,3)(3,4)(1,2)(3,4)(2,3)(3,4)(2,3)(1,2)(2,3). \tag{6}$$

它称为一个置换的相邻对换乘积分解。一般而言，这一分解不是唯一的。但是，任一分解的奇偶性是确定的。因此，若一置换可以分解成奇数个相邻对换的乘积，我们称其为奇置换。否则称为偶置换。

一个要特别指出的事实是，若定义一个置换 $\hat{P}$ 的奇偶性为 $(-1)^{\hat{P}}$，则将其第二行任意两个数对换后所得的置换的奇偶性为 $(-1)^{\hat{P}+1}$。

最后，我们讨论一个数列分割的问题。若将按数列 $1, 2, 3, \cdots, N$ 编号的球放到 m 个碗中，并要求第一个碗中有 n_1 个球，第二个碗中有 n_2 个球，第 m 个碗中有 n_m 个球 (自然，我们要求 $n_1 + n_2 + \cdots + n_m = N$)，问一共有多少种不同的放法？答案是

$$K = \frac{N!}{n_1! n_2! \cdots\cdots n_m!}. \tag{7}$$

$ 1.1 **单粒子态**

一个量子力学系统，在特定的边条件下，其定态 Schrödinger 方程的全部正交归一本征解给出了一个完备函数族。特别是在略去了粒子之间的相互作用之后，单体定态 Schrödinger 的本征函数族 $\{\psi_n(x)\}$，可以用来近似地描写粒子之间相互作用较弱时的多粒子态。为了回顾我们在本科量子力学课程中学到的有关单粒子态的知识，让我们先来看两个例子。

例 1.1: 考虑一个正方盒子，设其边长为 L。当一个粒子在盒内运动时，其定态 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}). \tag{8}$$

这个方程的通解为

$$\varphi(\mathbf{r}) = C_{\mathbf{k}} \exp\left(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\right). \tag{9}$$

为了确定 $\mathbf{k}$ 及归一化常数 $C_{\mathbf{k}}$，我们需要加上适当的边条件。常用的边条件为所谓周期性边条件，即要求 $\varphi(\mathbf{r})$ 在两两相对的盒壁上取相同的值。例如在 x 方向的两个盒壁上，我们要求

$$\varphi\left(\frac{L}{2}, y, z\right) = \varphi\left(-\frac{L}{2}, y, z\right). \tag{10}$$

由此我们得到

$$\exp\left(ik_x\frac{L}{2}+ik_y y+ik_z z\right)=\exp\left(-ik_x\frac{L}{2}+ik_y y+ik_z z\right), \tag{11}$$

或是

$$\exp\left(ik_x L\right)=1. \tag{12}$$

这就要求

$$k_x=\frac{2\pi}{L}n_x,\quad n_x=0,\ \pm1,\ \pm2,\cdots\cdots \tag{13}$$

同理，我们得到 k_y 及 k_z 可取的允许值为：

$$k_y=\frac{2\pi}{L}n_y,\quad k_z=\frac{2\pi}{L}n_z,\quad n_y,\ n_z=0,\ \pm1,\ \pm2,\cdots\cdots \tag{14}$$

因此，这个体系单粒子态的全体由下式给出

$$\varphi_{(n_x,n_y,n_z)}(x,y,z)=C_{n_x,n_y,n_z}\exp\left(i\frac{2\pi}{L}(n_x x+n_y y+n_z z)\right). \tag{15}$$

最后，我们由下式决定归一化常数 C_{n_x,n_y,n_z}

$$\begin{aligned}&\int_{-L/2}^{L/2}\int_{-L/2}^{L/2}\int_{-L/2}^{L/2}dxdydz|\varphi_{(n_1,n_2,n_3)}(x,y,z)|^2\\ =\ &\int_{-L/2}^{L/2}\int_{-L/2}^{L/2}\int_{-L/2}^{L/2}dxdydz|C_{n_x,n_y,n_z}|^2=|C_{n_x,n_y,n_z}|^2L^3=1.\end{aligned} \tag{16}$$

由此我们解得 $C_{n_x,n_y,n_z}=\frac{1}{\sqrt{L^3}}=\frac{1}{\sqrt{V}}$。而当 $(n_1,\,n_2,\,n_3)\neq(\widetilde{n}_1,\,\widetilde{n}_2,\,\widetilde{n}_3)$ 时，我们有

$$\begin{aligned}&\int_{-L/2}^{L/2}\int_{-L/2}^{L/2}\int_{-L/2}^{L/2}dxdydz\,\varphi_{(n_1,n_2,n_3)}(x,y,z)^*\,\varphi_{(\widetilde{n}_1,\widetilde{n}_2,\widetilde{n}_3)}(x,y,z)\\ =\ &\frac{1}{V}\int_{-L/2}^{L/2}\int_{-L/2}^{L/2}\int_{-L/2}^{L/2}dxdydz\ \exp\left(i\frac{2\pi}{L}(n_1-\widetilde{n}_1)x+i\frac{2\pi}{L}(n_2-\widetilde{n}_2)y+i\frac{2\pi}{L}(n_3-\widetilde{n}_3)z\right)\\ =\ &0.\end{aligned} \tag{17}$$

因此，一组正交归一的单粒子态由下式给出

$$\varphi_{(n_1,n_2,n_3)}(x,y,z)=\frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left(i\frac{2\pi}{L}(n_1x+n_2y+n_3z)\right). \tag{18}$$

这里，量子数 $n_1,\, n_2,\, n_3 = 0,\, \pm1,\, \pm2, \cdots\cdots$ 。当粒子同时有自旋自由度时，我们可将体系的单粒子态改写为

$$\widetilde{\varphi}_{(n_1,n_2,n_3,\uparrow)}(x,y,z,\uparrow) = \frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left(i\frac{2\pi}{L}(n_1x+n_2y+n_3z)\right)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$
$$\widetilde{\varphi}_{(n_1,n_2,n_3,\downarrow)}(x,y,z,\downarrow) = \frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left(i\frac{2\pi}{L}(n_1x+n_2y+n_3z)\right)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}. \tag{19}$$

下面，我们用记号 $k=(n_1,n_2,n_3,\sigma)$ 来简记本征态的量子数，而用 q 来标记其自由度 (x,y,z,s,s_z) 。当我们对 q 积分时， $\int dq$ 应理解为对 $\mathbf{r}$ 求积分，而对内部自由度求和。利用 Kronecker 符号，我们可将单粒子态的正交归一条件写成

$$\int dq\, \varphi^*_{k_1}(q)\varphi_{k_2}(q) = \delta_{k_1,k_2}. \tag{20}$$

例 1.2: 在一维谐振子势 $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 中运动的粒子的全部定态本征函数可被写作：

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}}e^{-m\omega x^2/2\hbar}H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right),\quad n=0,\,1,\,2,\cdots \tag{21}$$

其中 $H_n(x)$ 为厄密多项式。它们是 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_n(x) + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \tag{22}$$

在无穷远处为零的正交归一解。按照量子力学的基本原理， Schrödinger 方程 (22) 的任何一个解，都可以按照这些函数作展开，即

$$\varphi(x,t) = \sum_n a_n\psi_n(x)\exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right). \tag{23}$$

最后，我们要介绍一个下面常要用到的恒等式

$$\sum_k \varphi_k(q')\varphi^*_k(q) \equiv \sum_k \langle q'|\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|q\rangle = \delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\delta_{s's} \equiv \delta(q'-q). \tag{24}$$

证明：按照 Dirac 函数的定义，对于任何一个单粒子波函数 $\varphi(q,\,t)$ ，恒等式

$$\int dq\,\varphi(q,\,t)\,\delta(q'-q) = \varphi(q',\,t) \tag{25}$$

成立。又由于

$$\varphi(q,\,t)=\sum_k a_k\varphi_k(q)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_kt\right), \tag{26}$$

我们有

$$\begin{aligned}
&\int dq\left[\sum_{k_1}\varphi_{k_1}(q')\varphi^*_{k_1}(q)\right]\left[\sum_{k_2}a_{k_2}\varphi_{k_2}(q)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_{k_2}t\right)\right]\\
=\;&\sum_{k_1}\sum_{k_2}\varphi_{k_1}(q')a_{k_2}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_{k_2}t\right)\int dq\varphi^*_{k_1}(q)\varphi_{k_2}(q)\\
=\;&\sum_{k_1}\sum_{k_2}\varphi_{k_1}(q')a_{k_2}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_{k_2}t\right)\delta_{k_1,k_2}\\
=\;&\sum_{k_1}a_{k_1}\varphi_{k_1}(q')\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_{k_1}t\right)\\
=\;&\varphi(q',\,t).
\end{aligned} \tag{27}$$

这样，我们就验证了恒等式 (24) 。

$ 1.2 **全同粒子波函数**

现在，我们考虑体系内有 N 个全同粒子时的情况。很自然，同单粒子时的情况一样，N 个粒子的一般波函数应该可以按照一组正交归一函数展开，即

$$\psi(q_1,\,q_2,\cdots,q_N)=\sum_l C_l\psi_l(q_1,\,q_2,\cdots,q_N). \tag{28}$$

这里，$\{\psi_l\}$ 的选取，应该满足以下几个条件

(1) 正交归一；

(2) 体现体系是由 N 个单粒子组成的；

(3) 满足全同粒子体系应该满足的统计规律。

对于第三个条件，我们做一点说明。根据量子力学的基本原理，若全同粒子体系是由玻色子组成的，则波函数应该满足

$$\psi(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_N)=\psi(q_1,\cdots,q_j,\cdots,q_i,\cdots,q_N). \tag{29}$$

而对于费米子体系，则要求

$$\psi(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_N)=-\psi(q_1,\cdots,q_j,\cdots,q_i,\cdots,q_N). \tag{30}$$

因此，我们应当要求

(1) 对于玻色子有

$$\psi_l(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_N)=\psi_l(q_1,\cdots,q_j,\cdots,q_i,\cdots,q_N); \tag{31}$$

(2) 对于费米子有

$$\psi_l(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_N)=-\psi_l(q_1,\cdots,q_j,\cdots,q_i,\cdots,q_N) \tag{32}$$

成立。

在可以将粒子之间的相互作用作为微扰处理的情况下，一个多体体系的本征波函数 $\psi_l(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_N)$ 可以按照单粒子波函数的乘积做展开。既

(1) 对于玻色子，我们可以定义

$$\begin{aligned}&\psi_l(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_N)=\psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_N)\\ =\ & D\sum_{\hat{P}}\hat{P}\left(\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\cdots\varphi_{k_N}(q_N)\right)=\widetilde{D}\sum_{\{\hat{P}\}}\varphi_{k_1}\left(q_{P(1)}\right)\cdots\cdots\varphi_{k_N}\left(q_{P(N)}\right).\end{aligned} \tag{33}$$

这里，记号 $\Sigma_{\hat{P}}$ 和 $\Sigma_{\{\hat{P}\}}$ 分别代表对于全部的置换和给出不同的项的置换类的求和。而相应地， D 和 $\widetilde{D}$ 分别为全部展开式和合并同类项后的展开式的归一化常数。

(2) 对于费米子，我们可以定义

$$\begin{aligned}&\psi_l(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_N)=\psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_N)\\ =\ & D\sum_{\hat{P}}(-1)^{\hat{P}}\hat{P}\left(\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\cdots\varphi_{k_N}(q_N)\right)\\ =\ & D\sum_{\hat{P}}(-1)^{\hat{P}}\varphi_{k_1}\left(q_{P(1)}\right)\cdots\cdots\varphi_{k_N}\left(q_{P(N)}\right).\end{aligned} \tag{34}$$

在此波函数中，我们要求每一个态指标仅出现一次。因此，展开式中的项两两不同。归一化系数没有 D 与 $\widetilde{D}$ 的区别。

在说明这些定义和要求的合理性之前，让我们看一个具体的例子。

例 1.3: 假设有三个全同玻色子，而仅有两个态 k_1 和 k_2 。我们考虑下面两个可能的态 $\psi_{2k_1,k_2}(q_1,\ q_2,\ q_3)$ 和 $\psi_{k_1,2k_2}(q_1,\ q_2,\ q_3)$ 。按照定义，我们有

$$\begin{aligned}
& \psi_{2k_1,k_2}(q_1,\ q_2,\ q_3) \\
= \;& D_1\left[\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_1}(q_2)\varphi_{k_2}(q_3)+\varphi_{k_1}(q_2)\varphi_{k_1}(q_3)\varphi_{k_2}(q_1)+\varphi_{k_1}(q_3)\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_2}(q_2)\right. \\
+ \;& \left.\varphi_{k_1}(q_2)\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_2}(q_3)+\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_1}(q_3)\varphi_{k_2}(q_2)+\varphi_{k_1}(q_3)\varphi_{k_1}(q_2)\varphi_{k_2}(q_1)\right] \\
= \;& \widetilde{D}_1\left[\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_1}(q_2)\varphi_{k_2}(q_3)+\varphi_{k_1}(q_2)\varphi_{k_1}(q_3)\varphi_{k_2}(q_1)+\varphi_{k_1}(q_3)\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_2}(q_2)\right].
\end{aligned} \tag{35}$$

同理，我们有

$$\begin{aligned}
& \psi_{k_1,2k_2}(q_1,\ q_2,\ q_3) \\
= \;& \widetilde{D}_2\left[\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_2}(q_2)\varphi_{k_2}(q_3)+\varphi_{k_1}(q_2)\varphi_{k_2}(q_3)\varphi_{k_2}(q_1)+\varphi_{k_1}(q_3)\varphi_{k_2}(q_1)\varphi_{k_2}(q_2)\right].
\end{aligned} \tag{36}$$

显然，对于这两个函数，任意对换其中一对坐标，函数值并不改变。其次，由于 $(2k_1,k_2)\neq(k_1,2k_2)$ ，我们可以证明这两个函数正交。实际上，我们有

$$\begin{aligned}
& \int dq_1dq_2dq_3\ \psi^*_{2k_1,k_2}(q_1,\ q_2,\ q_3)\psi_{k_1,2k_2}(q_1,q_2,q_3) \\
= \;& \int dq_1dq_2dq_3\ \widetilde{D}^*_1\widetilde{D}_2 \\
\times \;& \left[\varphi^*_{k_1}(q_1)\varphi^*_{k_1}(q_2)\varphi^*_{k_2}(q_3)+\varphi^*_{k_1}(q_2)\varphi^*_{k_1}(q_3)\varphi^*_{k_2}(q_1)+\varphi^*_{k_1}(q_3)\varphi^*_{k_1}(q_1)\varphi^*_{k_2}(q_2)\right] \\
\times \;& \left[\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_2}(q_2)\varphi_{k_2}(q_3)+\varphi_{k_1}(q_2)\varphi_{k_2}(q_3)\varphi_{k_2}(q_1)+\varphi_{k_1}(q_3)\varphi_{k_2}(q_1)\varphi_{k_2}(q_2)\right].
\end{aligned} \tag{37}$$

乘开后，一共有 9 项。我们取其中第一项来看，有

$$\begin{aligned}
& \int dq_1dq_2dq_3\ \varphi^*_{k_1}(q_1)\varphi^*_{k_1}(q_2)\varphi^*_{k_2}(q_3)\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_2}(q_2)\varphi_{k_2}(q_3) \\
= \;& \left(\int dq_1\ \varphi^*_{k_1}(q_1)\varphi_{k_1}(q_1)\right)\left(\int dq_2\ \varphi^*_{k_1}(q_2)\varphi_{k_2}(q_2)\right)\left(\int dq_3\ \varphi^*_{k_2}(q_3)\varphi_{k_2}(q_3)\right).
\end{aligned} \tag{38}$$

由于第二个因子为零，导致整个乘积为零。同理，我们可证，其余的项也为零。这是由于，当两个态的单粒子态量子数不相同时，总可以找到一个坐标 q_i ，使得 $\varphi^*_\alpha(q_i)$ 与 $\varphi_\beta(q_i)$ 具有不同的量子数 α 和 β 。因此，积分值

$$\int \varphi^*_\alpha(q_i)\varphi_\beta(q_i)dq_i=0. \tag{39}$$

现在，我们计算归一化常数 $\widetilde{D}_1$ 和 $\widetilde{D}_2$ 。由归一化条件

$$\begin{aligned}
1 &= \int dq_1dq_2dq_3\, \psi^*_{2k_1,k_2}(q_1,q_2,q_3)\psi_{2k_1,k_2}(q_1,q_2,q_3) \\
&= |\widetilde{D}_1|^2 \Big(\int dq_1dq_2dq_3\, \varphi^*_{k_1}(q_1)\varphi^*_{k_1}(q_2)\varphi^*_{k_2}(q_3)\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_1}(q_2)\varphi_{k_2}(q_3) \\
&+ \int dq_1dq_2dq_3\, \varphi^*_{k_1}(q_2)\varphi^*_{k_1}(q_3)\varphi^*_{k_2}(q_1)\varphi_{k_1}(q_2)\varphi_{k_1}(q_3)\varphi_{k_2}(q_1) \\
&+ \int dq_1dq_2dq_3\, \varphi^*_{k_1}(q_3)\varphi^*_{k_1}(q_1)\varphi^*_{k_2}(q_2)\varphi_{k_1}(q_3)\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_2}(q_2)\Big) \\
&= 3|\widetilde{D}_1|^2, \qquad (40)
\end{aligned}$$

我们得出 $\widetilde{D}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$ 。同理可证， $\widetilde{D}_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$ 。

从上面的计算中，我们看到

(1) $\psi_{2k_1,k_2}(q_1,q_2,q_3)$ 中的每一项仅与自身内积为 1 ，而与其它项的内积均为零。这是一个普遍的规律。

(2) 归一化常数 $\widetilde{D}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$ 可以重新被写作

$$\widetilde{D}_1 = \frac{\sqrt{2!1!}}{\sqrt{3!}} = \frac{\sqrt{n_{k_1}!n_{k_2}!}}{\sqrt{N!}}. \qquad (41)$$

这是普遍成立的。例如，我们也有

$$\widetilde{D}_2 = \frac{\sqrt{n_{k_1}!n_{k_2}!}}{\sqrt{N!}} = \frac{\sqrt{1!2!}}{\sqrt{3!}} = \frac{1}{\sqrt{3}}. \qquad (42)$$

现在，让我们来研究玻色子基底波函数的一般表达式

$$\begin{aligned}
\psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots\cdots,q_N) &= D\sum_{\hat{P}} \hat{P}\left[\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\cdots\varphi_{k_N}(q_N)\right] \\
&= \widetilde{D}\sum_{\{\hat{P}\}} \hat{P}\left[\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\cdots\varphi_{k_N}(q_N)\right]. \qquad (43)
\end{aligned}$$

当我们调换坐标 q_i 与 q_j ，等于对波函数做一个对换 (i,j) ，即

$$\begin{aligned}
& (i,\, j)\psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_N) \\
=\ & \psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots,q_j,\cdots,q_i,\cdots,q_N) \\
=\ & D\sum_{\hat{P}}(i,\, j)\hat{P}(\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\cdots\varphi_{k_N}(q_N)). \qquad (44)
\end{aligned}$$

另一方面，置换群的一个定理告诉我们，当用一个固定的置换去乘 $N!$ 个置换的每一个时，乘积即取遍了这个置换群中的所有元素。换句话说，我们有

$$\{(i,j)\hat{P}\} = \{P'\} = \{\hat{P}\} \tag{45}$$

与原来的置换群恒等。因此，我们得到

$$\begin{aligned}
& \psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots,q_j,\cdots,q_i,\cdots,q_N) \\
= \ & D\sum_{\hat{P}} \left[(i,\ j)\hat{P}\right](\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\cdots\varphi_{k_N}(q_N)) \\
= \ & D\sum_{\hat{P}'} \hat{P}'(\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\cdots\varphi_{k_N}(q_N)) \\
= \ & \psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_N).
\end{aligned} \tag{46}$$

也就是说，这些波函数的确满足全同玻色子体系的统计要求。

下面，我们来计算归一化常数 $\widetilde{D}$ 。按照归一化条件，我们有

$$\begin{aligned}
1 \ &= \int dq_1\cdots\cdots dq_N\ \psi_l^*(q_1,\cdots\cdots,q_N)\psi_l(q_1,\cdots\cdots,q_N) \\
&= |\widetilde{D}|^2\sum_{\{\hat{P}_1\}}\sum_{\{\hat{P}_2\}}\int dq_1\cdots\cdots dq_N\ \hat{P}_1\left(\varphi^*_{k_1}(q_1)\cdots\cdots\varphi^*_{k_N}(q_N)\right) \\
&\times \ \hat{P}_2\left(\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\cdots\varphi_{k_N}(q_N)\right).
\end{aligned} \tag{47}$$

如同在上面的例子中所示，展开式中的每一项 $\varphi_{k_1}\left(q_{P(1)}\right)\cdots\cdots\varphi_{k_N}\left(q_{P(N)}\right)$ 仅与其自身内积非零，并且等于 1 。这样，公式 (47) 化为

$$1 = |\widetilde{D}|^2 M. \tag{48}$$

这里 M 为 $\psi_l(q_1,\cdots\cdots,q_N)$ 展开式中的项数。按照我们的构造法，这一数目应等于将 N 个小球放在 N 个碗中，并要求第一个碗中有 n_1 个，第二个碗中有 n_2 个 $\cdots\cdots$ 的全部可能的不同取法数(有些数 n_s 可取做零，但 $n_1+\cdots+n_N=N$) 。我们已知这一数目为

$$M = \frac{N!}{n_{k_1}!n_{k_2}!\cdots\cdots n_{k_N}!}. \tag{49}$$

因此，

$$\widetilde{D} = \sqrt{\frac{n_{k_1}!n_{k_2}!\cdots\cdots n_{k_N}!}{N!}}. \tag{50}$$

这样，一组 N 个全同玻色子的完备正交归一函数可取为

$$\begin{aligned}&\psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\ q_2,\cdots\cdots,q_N)\\ =&\ \sqrt{\frac{n_1!n_2!\cdots\cdots n_k!}{N!}}\sum_{\{\hat{P}\}}\hat{P}\left(\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\cdots\varphi_{k_N}(q_N)\right).\end{aligned}\tag{51}$$

下面，让我们来研究一下费米子波函数。按照定义，我们有

$$\psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots\cdots,q_N)=D\sum_{\hat{P}}(-1)^{\hat{P}}\hat{P}(\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\cdots\varphi_{k_N}(q_N)).\tag{52}$$

首先，同玻色子时的情形一样，我们应当有

$$D=\sqrt{\frac{n_{k_1}!n_{k_2}!\cdots\cdots n_{k_N}!}{N!}}=\frac{1}{\sqrt{N!}}.\tag{53}$$

这是由于，根据 $\psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots\cdots,q_N)$ 的构造法，展开式中每一项仅与其自身的内积非零且等于：

$$\begin{aligned}&(-1)^{\hat{P}}(-1)^{\hat{P}}\int dq_1\cdots dq_N\left[\varphi^*_{k_1}(q_{P(1)})\varphi_{k_1}(q_{P(1)})\right]\cdots\left[\varphi^*_{k_N}(q_{P(N)})\varphi_{k_N}(q_{P(N)})\right]\\ =&\ 1\times1=1.\end{aligned}\tag{54}$$

另一方面，在波函数 $\psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots\cdots,q_N)$ 中，我们有 $k_1\neq k_2\neq\cdots\neq k_N$ 。故 $\widetilde{D}=D$ 。因此，上面的结论仍然成立。又由于

$$\begin{aligned}&(i,j)\psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots\cdots,q_N)\\ =&\ \psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots,q_j,\cdots,q_i,\cdots,q_N)\\ =&\ \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\hat{P}}(-1)^{\hat{P}}(i,j)\hat{P}(\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\cdots\varphi_{k_N}(q_N))\\ =&\ \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\hat{P}}(-1)^{\hat{P}+1}(-1)\left[(i,j)\hat{P}\right]\left[\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\cdots\varphi_{k_N}(q_N)\right].\end{aligned}\tag{55}$$

令 $(i,j)\hat{P}=\hat{P}'$ ，我们有 $(-1)^{\hat{P}'}=(-1)^{\hat{P}+1}$ 。因此，上式化为

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\hat{P}'}(-1)^{\hat{P}'}(-1)\hat{P}'\left(\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\cdots\varphi_{k_N}(q_N)\right)\\ =&\ -\psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots\cdots,q_N).\end{aligned}\tag{56}$$

即这些波函数满足 Dirac-Fermi 统计规律。

最后，我们说明一下，为什么要求

$$k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq \cdots \neq k_N \tag{57}$$

成立。即要求每个单粒子态只能出现一次。这是由于，根据我们的构造法则，若有 $k_1 = k_2$ ，则对于 $\psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots\cdots,q_N)$ 中的任何一项

$$(-1)^{\hat{P}}\varphi_{k_1}(q_{P(1)} = q_i)\varphi_{k_1}(q_{P(2)} = q_j)\varphi_{k_3}(q_{P(3)})\cdots\varphi_{k_N}(q_{P(N)}), \tag{58}$$

我们总可以找到另外一项，它对应于 $\hat{P}' = (i,j)\hat{P} \neq \hat{P}$ ，并且具有形式

$$(-1)^{\hat{P}}(-1)\varphi_{k_1}(q_j)\varphi_{k_1}(q_i)\varphi_{k_3}(q_{P(3)})\cdots\varphi_{k_N}(q_{P(N)}). \tag{59}$$

这两项之和为零。重复这一过程，我们可证，当 $k_1 = k_2$ 时，

$$\psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots\cdots,q_N) \equiv 0 \tag{60}$$

成立。因此，任意一个单粒子态 ψ_k 在 $\psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots\cdots,q_N)$ 或者不出现，或者只出现一次。

利用行列式的定义，我们可以将满足 Dirac-Fermi 统计的多体波函数写作

$$\psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots\cdots,q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \varphi_{k_1}(q_1) & \varphi_{k_2}(q_1) & \cdots & \varphi_{k_N}(q_1) \\ \varphi_{k_1}(q_2) & \varphi_{k_2}(q_2) & \cdots & \varphi_{k_N}(q_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_{k_1}(q_N) & \varphi_{k_2}(q_N) & \cdots & \varphi_{k_N}(q_N) \end{vmatrix}. \tag{61}$$

它被称作 Slater 行列式。

这样，对于玻色子及费米子，我们得到了 N 个粒子的一组完备正交归一基。而一般的波函数 $\psi(q_1,\cdots\cdots,q_N)$ 可按它们做展开。

显然，这一表象（波函数表象）并不是很方便的。一个自然的问题是，我们可否引入一个等价但更为简捷的表象来研究全同粒子体系。实际上，我们注意到，在任意基向量 $\psi_{(k_1,\cdots\cdots,k_N)}(q_1,\cdots\cdots,q_N)$ 中，最重要的是单粒子态 $k_1,\cdots,k_N$

出现的次数。一旦知道了这一信息，我们就可利用 $\psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots\cdots,q_N)$ 的定义直接写出它来。因此，一个自然的想法是引入记号

$$|n_{k_1},\, n_{k_2},\cdots,n_{k_N}\rangle \tag{62}$$

来表示这个态。其中 n_k 表示单粒子态 φ_{k_i} 在 $\psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}$ 中出现的次数。并要求

$$n_{k_1}+n_{k_2}+\cdots+n_{k_N}=N \tag{63}$$

成立。显然

$$\psi_{k_1,\cdots\cdots,k_N}(q_1,\cdots,q_N)\longleftrightarrow|n_{k_1},\, n_{k_2},\cdots,n_{k_N}\rangle \tag{64}$$

是一一对应的。例如，我们可将波函数 $\psi_{2k_1,k_2}(q_1,q_2,q_3)$ 写作 $|n_{k_1}=2,n_{k_2}=1\rangle$，而将 $\psi_{k_1,2k_2}(q_1,\,q_2,\,q_3)$ 写作 $|n_{k_1}=1,\,n_{k_2}=2\rangle$ 。

一个有趣的问题是，记号 $|n_{k_1},n_{k_2}\rangle$ 与 $|n_{k_2},n_{k_1}\rangle$ 是否代表同一个态？对于玻色子，答案是肯定的。而对于费米子，我们则要稍微谨慎一点。按照定义，我们有

$$|n_{k_1}=1,\,n_{k_2}=1\rangle\longleftrightarrow\psi_{k_1,k_2}(q_1,\,q_2)=\frac{1}{\sqrt{2!}}\begin{vmatrix}\varphi_{k_1}(q_1) & \varphi_{k_2}(q_1)\\ \varphi_{k_1}(q_2) & \varphi_{k_2}(q_2)\end{vmatrix} \tag{65}$$

$$|n_{k_2}=1,\,n_{k_1}=1\rangle\longleftrightarrow\psi_{k_2,k_1}(q_1,q_2)=\frac{1}{\sqrt{2!}}\begin{vmatrix}\varphi_{k_2}(q_1) & \varphi_{k_1}(q_1)\\ \varphi_{k_2}(q_2) & \varphi_{k_1}(q_2)\end{vmatrix}. \tag{66}$$

根据行列式的定义，我们有

$$|n_{k_1},\,n_{k_2}\rangle=\,-|n_{k_2},n_{k_1}\rangle. \tag{67}$$

因此，它们并不相等。

如何解决这一问题呢？为此，我们需要引入所谓单粒子态的“产生算符”$\hat{a}_k^\dagger$ 和“湮灭算符”$\hat{a}_k$，并定义它们之间的对易关系。

首先，我们引入一个态 $|0\rangle$，称为真空态。这一状态在波函数表象中并没有对应。我们要求它归一化，即

$$\langle 0|0\rangle=1. \tag{68}$$

在此基础上，我们可定义算符 $\hat{a}_k^\dagger$ 。我们要求，当它作用在真空态上时，产生一个量子数为 k 的单粒子态 φ_k 。即我们有

$$\hat{a}_k^\dagger|0\rangle = |n_k = 1\rangle. \tag{69}$$

同时，我们还要求

$$\langle n_k = 1|n_k = 1\rangle = 1 \tag{70}$$

成立。这一算符称为单粒子态 φ_k 的产生算符。

进一步，我们引入湮灭算符 $\hat{a}_k$ 。它由下式定义

$$\hat{a}_k|0\rangle = 0, \quad \hat{a}_k|n_k = 1\rangle = |0\rangle. \tag{71}$$

从数学的角度看，这样两个算符是共轭的。按照定义，一个算符 $\hat{A}$ 的共轭算符 $\hat{A}^\dagger$ 由恒等式

$$\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi_1|\psi_2\rangle \tag{72}$$

来确定。对于 $\hat{a}_k$ 和 $\hat{a}_k^\dagger$ ，我们有

$$\left\langle 0\left|\hat{a}_k^\dagger\right|0\right\rangle = \langle 0|n_k = 1\rangle = 0, \tag{73}$$

以及

$$\langle\hat{a}_k 0|0\rangle = 0. \tag{74}$$

故

$$\left\langle 0\left|\hat{a}_k^\dagger\right|0\right\rangle = \langle\hat{a}_k 0|0\rangle \tag{75}$$

成立。另一方面，我们还有

$$\left\langle n_k = 1\left|\hat{a}_k^\dagger\right|0\right\rangle = \langle n_k = 1|n_k = 1\rangle = 1 = \langle\hat{a}_k n_k = 1|0\rangle = \langle 0|0\rangle = 1. \tag{76}$$

因此， $\hat{a}_k$ 与 $\hat{a}_k^\dagger$ 的确互成共轭关系。

现在，让我们来看一下算符 $\hat{n}_k = \hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k$ 。将它作用 $|0\rangle$ 上，我们得到

$$\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k|0\rangle = 0. \tag{77}$$

而将之作用在态 $|n_k=1\rangle$ 上，我们又得到

$$\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k|n_k=1\rangle=\hat{a}_k^\dagger|0\rangle=|n_k=1\rangle. \tag{78}$$

因此，我们可将 $\hat{n}_k$ 定义为粒子数算符。作用在一个态上时，它给出该态中单粒子态 k 被占据的次数。

为了更为细致地研究这些产生，湮灭算符，先让我们考虑费米子体系。下面，我们分别用 $\hat{C}_k^\dagger$ 和 $\hat{C}_k$ 表示费米子产生消灭算符。

(1) 由于在同一个单粒子态上，不能有超过一个费米子存在，我们应有

$$\hat{C}_k^\dagger \hat{C}_k^\dagger|0\rangle=\hat{C}_k^+|n_k=1\rangle=0. \tag{79}$$

因此，我们要求

$$\hat{C}_k^\dagger \hat{C}_k^\dagger=0. \tag{80}$$

取共轭后，我们有

$$\left(\hat{C}_k^\dagger \hat{C}_k^\dagger\right)^\dagger=\hat{C}_k\hat{C}_k=0. \tag{81}$$

(2) 考虑算符

$$\hat{C}_k^\dagger \hat{C}_k+\hat{C}_k\hat{C}_k^\dagger\equiv\left\{\hat{C}_k,\,\hat{C}_k^\dagger\right\}. \tag{82}$$

将这个算符作用在 $|0\rangle$ 上有

$$\hat{C}_k^\dagger \hat{C}_k\,|0\rangle+\hat{C}_k\hat{C}_k^\dagger\,|0\rangle=\hat{C}_k\,|n_k=1\rangle=|0\rangle. \tag{83}$$

作用在 $|n_k=1\rangle$ 上有

$$\hat{C}_k^\dagger \hat{C}_k\,|n_k=1\rangle+\hat{C}_k\hat{C}_k^\dagger\,|n_k=1\rangle=\hat{C}_k^\dagger \hat{C}_k\,|n_k=1\rangle=\hat{C}_k^\dagger\,|0\rangle=|n_k=1\rangle. \tag{84}$$

因此，我们很自然地要求

$$\left\{\hat{C}_k,\,\hat{C}_k^\dagger\right\}=\hat{I}. \tag{85}$$

(3) 再考虑算符 $\hat{C}_k^\dagger \hat{C}_{k'}^\dagger+\hat{C}_{k'}^\dagger \hat{C}_k^\dagger$。定义

$$\hat{C}_k^\dagger \hat{C}_{k'}^\dagger\,\Big|\,0\Big\rangle=|n_k=1,\,n_{k'}=1\rangle. \tag{86}$$

因此，我们有

$$\begin{aligned}\hat{C}_k^\dagger \hat{C}_{k'}^\dagger |0\rangle + \hat{C}_{k'}^\dagger \hat{C}_k^\dagger |0\rangle &= |n_k = 1,\, n_{k'} = 1\rangle + |n_{k'} = 1,\, n_k = 1\rangle \\ = \;\; & |n_k = 1,\, n_{k'} = 1\rangle - |n_k = 1,\, n_{k'} = 1\rangle = 0. \end{aligned} \tag{87}$$

因此，我们要求

$$\hat{C}_k^\dagger \hat{C}_{k'}^\dagger + \hat{C}_{k'}^\dagger \hat{C}_k^\dagger \equiv \left\{\hat{C}_k^\dagger,\, \hat{C}_{k'}^\dagger\right\} = 0. \tag{88}$$

取此式的共轭后我们有

$$\hat{C}_k \hat{C}_{k'} + \hat{C}_{k'} \hat{C}_k \equiv \left\{\hat{C}_k,\, \hat{C}_{k'}\right\} = 0. \tag{89}$$

(4) 最后，让我们考虑 $\hat{C}_k^\dagger$ 及 $\hat{C}_{k'}$ 的对易关系。同样，我们取一个特殊的态

$$|n_k = 0,\, n_{k'} = 1\rangle = \hat{C}_{k'}^\dagger |0\rangle. \tag{90}$$

由于

$$\hat{C}_k^\dagger \hat{C}_{k'} |n_k = 0,\, n_{k'} = 1\rangle = \hat{C}_k^\dagger \hat{C}_{k'} \hat{C}_{k'}^\dagger |0\rangle = \hat{C}_k^\dagger \left(1 - \hat{C}_{k'}^\dagger \hat{C}_{k'}\right) |0\rangle = \hat{C}_k^\dagger |0\rangle, \tag{91}$$

以及

$$\begin{aligned}\hat{C}_{k'} \hat{C}_k^\dagger |n_k = 0,\, n_{k'} = 1\rangle &= \hat{C}_{k'} \hat{C}_k^\dagger \hat{C}_{k'}^\dagger |0\rangle = -\hat{C}_{k'} \hat{C}_{k'}^\dagger \hat{C}_k^\dagger |0\rangle \\ = \;\; & -(1 - \hat{n}_{k'})\, \hat{C}_k^\dagger |0\rangle = -\,\hat{C}_k^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \tag{92}$$

因此，两式相加后有

$$\left(\hat{C}_k^\dagger \hat{C}_{k'} + \hat{C}_{k'} \hat{C}_k^\dagger\right) |n_k = 0,\, n_{k'} = 1\rangle = 0. \tag{93}$$

所以我们要求

$$\hat{C}_k^\dagger \hat{C}_{k'} + \hat{C}_{k'} \hat{C}_k^\dagger \equiv \left\{\hat{C}_k^\dagger,\, \hat{C}_{k'}\right\} = 0. \tag{94}$$

在以后的计算中，这些反对易关系的正确性由它们的自洽性来验证。

一般地，我们定义

$$\hat{C}_{k_1}^\dagger \hat{C}_{k_2}^\dagger \cdots \hat{C}_{k_N}^\dagger |0\rangle \equiv |n_{k_1} = 1,\, n_{k_2} = 1, \cdots, n_{k_N} = 1\rangle. \tag{95}$$

在此定义下，记号

$$\hat{C}_k^\dagger \left|n_{k_1},\, n_{k_2}, \cdots, n_{k_N}\right\rangle \tag{96}$$

所代表的态，可由“火车到站”，乘客按顺序下车的原理依次计算。

接下来，让我们研究一下玻色子算符所应满足的对易关系。同费米子的情况一样，我们可以验证

$$\left[\hat{a}_k,\, \hat{a}_k^\dagger\right] = 1,\quad \left[\hat{a}_k,\, \hat{a}_{k'}^\dagger\right] = 0,\quad \left[\hat{a}_k^\dagger,\, \hat{a}_{k'}^\dagger\right] = 0,\quad \left[\hat{a}_k,\, \hat{a}_{k'}\right] = 0, \tag{97}$$

唯一不同于费米子体系的地方是，由于一个波色单粒子能级可以被超过一个以上的粒子占据，因此，$\left(\hat{a}_k^\dagger\right)^n$ 一般不为零。实际上，我们有

$$\left(\hat{a}_k^\dagger\right)^n\, |0\rangle = d_n\, |n_k = n\rangle. \tag{98}$$

这是由于，将 $\hat{n}_k$ 作用到这个态上后，我们有

$$\hat{n}_k\, \left(\hat{a}_k^\dagger\right)^n\, |0\rangle = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k\, \left(\hat{a}_k^\dagger\right)^n\, |0\rangle. \tag{99}$$

为了计算这一表达式，我们先利用恒等式

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} + \left[\hat{A},\, \hat{B}\right], \tag{100}$$

将它写成

$$\hat{n}_k\, \left(\hat{a}_k^\dagger\right)^n\, |0\rangle = \left(\hat{a}_k^\dagger\right)^n\, \hat{n}_k\, |0\rangle + \left[\hat{n}_k,\, \left(\hat{a}_k^\dagger\right)^n\right]\, |0\rangle = \left[\hat{n}_k,\, \left(\hat{a}_k^\dagger\right)^n\right]\, |0\rangle. \tag{101}$$

然后，我们再利用恒等式

$$\left[\hat{A},\, \hat{B}\hat{C}\cdots\hat{M}\right] = \left[\hat{A},\, \hat{B}\right]\hat{C}\cdots\hat{M} + \hat{B}\left[\hat{A},\, \hat{C}\right]\cdots\hat{M} + \hat{B}\hat{C}\cdots\left[\hat{A},\, \hat{M}\right], \tag{102}$$

将式中的对易子写作

$$\left[\hat{n}_k,\, (\hat{a}_k^\dagger)^n\right] = \left[\hat{n}_k,\, \hat{a}_k^\dagger\right](\hat{a}_k^\dagger)^{n-1} + \cdots + (\hat{a}_k^\dagger)^{n-1}\left[\hat{n}_k,\, \hat{a}_k^\dagger\right] = n(\hat{a}_k^\dagger)^n. \tag{103}$$

将之代入公式 (101) 后，我们得到

$$\hat{n}_k\, \left(\hat{a}_k^\dagger\right)^n\, |0\rangle = n\, \left(\hat{a}_k^\dagger\right)^n\, |0\rangle. \tag{104}$$

也就是说，这样定义的态的确是粒子数算符 $\hat{n}_k$ 的本征态，且本征值为 n 。

下面我们要确定归一化常数 d_n 。由定义出发，我们有

$$\begin{aligned} I_n &\equiv \left\langle 0 \left| (\hat{a}_k)^n (\hat{a}_k^\dagger)^n \right| 0 \right\rangle = \left\langle 0 \left| (\hat{a}_k)^{n-1} \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger (\hat{a}_k^\dagger)^{n-1} \right| 0 \right\rangle \\ &= \left\langle 0 \left| (\hat{a}_k)^{n-1} (1 + \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k)(\hat{a}_k^\dagger)^{n-1} \right| 0 \right\rangle = I_{n-1} + \left\langle 0 \left| (\hat{a}_k)^{n-1} (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k)(\hat{a}_k^\dagger)^{n-1} \right| 0 \right\rangle \\ &= I_{n-1} + (n-1) \left\langle 0 \left| (\hat{a}_k)^{n-1} (\hat{a}_k^\dagger)^{n-1} \right| 0 \right\rangle \\ &= n I_{n-1} = n \cdot (n-1) I_{n-2} = \cdots = n \cdot (n-1) \cdots 2 \cdot 1 \cdot I_0. \end{aligned} \tag{105}$$

而 $I_0 = \langle 0|0 \rangle = 1$ 。因此， $I_n = n!$ 。

这样，若我们令

$$|n_k = n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}_k^\dagger)^n |0\rangle, \tag{106}$$

则它是归一化的。利用这一归一化条件，我们可以进一步得到

$$\hat{a}_k^\dagger \, |n_k = n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}_k^\dagger)^{n+1} \, |0\rangle = \frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}} (\hat{a}_k^\dagger)^{n+1} \, |0\rangle = \sqrt{n+1} \; |n_k = n+1\rangle, \tag{107}$$

以及

$$\begin{aligned} \hat{a}_k \, |n_k = n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \, \hat{a}_k (\hat{a}_k^+)^n \, |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left((\hat{a}_k^\dagger)^n \hat{a}_k \right) |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[\hat{a}_k, \, (\hat{a}_k^\dagger)^n \right] |0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[\hat{a}_k, \, (\hat{a}_k^\dagger)^n \right] |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \, n (\hat{a}_k^\dagger)^{n-1} \, |0\rangle \\ &= \sqrt{n} \frac{1}{\sqrt{(n-1)!}} \, (\hat{a}_k^\dagger)^{n-1} \, |0\rangle = \sqrt{n} \, |n_k = n-1\rangle. \end{aligned} \tag{108}$$

在这一推导过程中，我们再一次利用了恒等式 (100) 和恒等式 (102) 。

引入了这些记号之后，我们可以将一个多体玻色粒子态写作

$$|n_{k_1}, \, n_{k_2}, \cdots, n_{k_N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_{k_1}! \, n_{k_2}! \cdots n_{k_N}!}} (\hat{a}_{k_1}^\dagger)^{n_{k_1}} \cdots (\hat{a}_{k_N}^\dagger)^{n_{k_N}} |0\rangle. \tag{109}$$

练习一：令

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2} \left(\hat{C}_\uparrow^\dagger \hat{C}_\downarrow + \hat{C}_\downarrow^\dagger \hat{C}_\uparrow \right), \quad \hat{S}_y = \frac{1}{2i} \left(\hat{C}_\uparrow^\dagger \hat{C}_\downarrow - \hat{C}_\downarrow^\dagger \hat{C}_\uparrow \right), \quad \hat{S}_z = \frac{1}{2} \left(\hat{n}_\uparrow - \hat{n}_\downarrow \right), \tag{110}$$

或者

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2}\left(\hat{a}_\uparrow^\dagger \hat{a}_\downarrow + \hat{a}_\downarrow^\dagger \hat{a}_\uparrow\right), \quad \hat{S}_x = \frac{1}{2i}\left(\hat{a}_\uparrow^\dagger \hat{a}_\downarrow - \hat{a}_\downarrow^\dagger \hat{a}_\uparrow\right), \quad \hat{S}_z = \frac{1}{2}\left(\hat{n}_\uparrow - \hat{n}_\downarrow\right). \tag{111}$$

验证它们都满足对易关系式

$$\left[\hat{S}_\alpha, \, \hat{S}_\beta\right] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{S}_\gamma. \tag{112}$$

\$ 1.3 玻色子单体和二体算符的表达式

1.3.1 单体算符

在一个多体量子体系中，许多力学量可以被写成下面的形式

$$\hat{F} = \sum_{i=1}^{N} \hat{f}(q_i). \tag{113}$$

例如，体系的总动量算符可以被写作

$$\hat{P} = \sum_{i=1}^{N} \hat{p}_i = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hbar}{i}\left(\mathbf{i}\frac{\partial}{\partial x_i} + \mathbf{j}\frac{\partial}{\partial y_i} + \mathbf{k}\frac{\partial}{\partial z_i}\right) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hbar}{i}\hat{\nabla}_i. \tag{114}$$

这里，$\hat{\nabla}_i$ 只作用在与坐标 $\mathbf{r}_i$ 有关的单粒子波函数 $\varphi_k(\mathbf{r}_i)$ 上。对于这些算符，我们有等式

$$\langle \psi_{n_{k_1}\cdots n_{k_N}}, \, \hat{F}\psi_{n'_{k_1}\cdots n'_{k_N}} \rangle = N \langle \psi_{n_{k_1}\cdots n_{k_N}}, \, \hat{f}(q_1)\psi_{n'_{k_1}\cdots n'_{k_N}} \rangle \tag{115}$$

成立。

例 1.4: 让我们以波函数 $\psi_{k_1,2k_2}(q_1, \, q_2, \, q_3)$ 及 $\psi_{2k_1,k_2}(q_1, \, q_2, \, q_3)$ 为例。按定义，我们有

$$\begin{aligned}
&(\psi_{k_1,2k_2}, \, \hat{f}(q_1)\psi_{2k_1,k_2}) = \int dq_1 dq_2 dq_3 \, \psi^*_{k_1,2k_2}\hat{f}(q_1)\psi_{2k_1,k_2} = \widetilde{D}_2^*\widetilde{D}_1 \int dq_1 dq_2 dq_3 \\
\times \quad & \left[\varphi^*_{k_1}(q_1)\varphi^*_{k_2}(q_2)\varphi^*_{k_2}(q_3) + \varphi^*_{k_1}(q_2)\varphi^*_{k_2}(q_3)\varphi^*_{k_2}(q_1) + \varphi^*_{k_1}(q_3)\varphi^*_{k_2}(q_1)\varphi^*_{k_2}(q_2)\right] \\
\times \quad & \hat{f}(q_1) \times \\
\times \quad & \left[\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_1}(q_2)\varphi_{k_2}(q_3) + \varphi_{k_1}(q_2)\varphi_{k_1}(q_3)\varphi_{k_2}(q_1) + \varphi_{k_1}(q_3)\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_2}(q_2)\right].
\end{aligned} \tag{116}$$

若我们任取一项，比如

$$\begin{aligned}
& \int dq_1 dq_2 dq_3 \, \varphi^*_{k_1}(q_1)\varphi^*_{k_2}(q_2)\varphi^*_{k_2}(q_3)\hat{f}(q_1)\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_1}(q_2)\varphi_{k_2}(q_3) \\
= \quad & \left(\int dq_1 \, \varphi^*_{k_1}(q_1)\hat{f}(q_1)\varphi_{k_1}(q_1)\right)\left(\int dq_2 \, \varphi^*_{k_2}(q_2)\varphi_{k_1}(q_2)\right)\left(\int dq_3 \, \varphi^*_{k_2}(q_3)\varphi_{k_2}(q_3)\right)
\end{aligned} \tag{117}$$

由于第二个因子为零，故整个积分为零。实际上，不为零的项只有

$$\int dq_1 dq_2 dq_3\ \varphi^*_{k_1}(q_2)\varphi^*_{k_2}(q_3)\varphi^*_{k_2}(q_1)\hat{f}(q_1)\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_1}(q_2)\varphi_{k_2}(q_3) \tag{118}$$

和

$$\int dq_1 dq_2 dq_3\ \varphi^*_{k_1}(q_3)\varphi^*_{k_2}(q_1)\varphi^*_{k_2}(q_2)\hat{f}(q_1)\varphi_{k_1}(q_3)\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_2}(q_2) \tag{119}$$

两项。我们计算第一项。

$$\begin{aligned}
&\int dq_1 dq_2 dq_3\ \varphi^*_{k_1}(q_2)\varphi^*_{k_2}(q_3)\varphi^*_{k_2}(q_1)\hat{f}(q_1)\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_1}(q_2)\varphi_{k_2}(q_3) \\
=\ &\left(\int dq_1\ \varphi^*_{k_2}(q_1)\hat{f}(q_1)\varphi_{k_1}(q_1)\right)\left(\int dq_2\ \varphi^*_{k_1}(q_2)\varphi_{k_1}(q_2)\right)\left(\int dq_3\ \varphi^*_{k_2}(q_3)\varphi_{k_2}(q_3)\right) \\
=\ &\int dq_1\ \varphi^*_{k_2}(q_1)\hat{f}(q_1)\varphi_{k_1}(q_1) \equiv f_{21}.
\end{aligned} \tag{120}$$

同理，计算第二项后，我们发现它也等于 f_{21} 。因此，我们有

$$\left(\psi_{k_1,2k_2},\ \hat{f}(q_1)\psi_{2k_1,k_2}\right) = 2\widetilde{D}^*_2\widetilde{D}_1 f_{21}. \tag{121}$$

按照同样的方法，我们可以得到：

$$\left(\psi_{k_1,2k_2},\ \hat{f}(q_2)\psi_{2k_1,k_2}\right) = 2\widetilde{D}^*_2\widetilde{D}_1 f_{21} = \left(\psi_{k_1,2k_2},\ \hat{f}(q_3)\psi_{2k_1,k_2}\right). \tag{122}$$

因此，我们有

$$\left(\psi_{k_1,2k_2},\ \left[\hat{f}(q_1)+\hat{f}(q_2)+\hat{f}(q_3)\right]\psi_{2k_1,k_2}\right) = 3(\psi_{k_1,2k_2}, f(q_1)\psi_{2k_1,k_2}). \tag{123}$$

这一等式是普适的，其证明如下。

为了确定起见，让我们以费米子体系为例。任取一对自由度 q_i 和 q_j 。我们考虑

$$\begin{aligned}
&M \equiv \langle\psi_{k'_1,k'_2,\cdots\cdots,k'_N}|\left[\hat{f}(q_i)-\hat{f}(q_j)\right]|\psi_{k_1,k_2,\cdots\cdots,k_N}\rangle \\
=\ &\int dq_1\cdots dq_N \frac{1}{\sqrt{N!}}\left[\sum_{\hat{P}_1}(-1)^{P_1}\hat{P}_1\left(\varphi^*_{k'_1}(q_1)\cdots\varphi^*_{k'_i}(q_i)\cdots\varphi^*_{k'_j}(q_j)\cdots\varphi^*_{k'_N}(q_N)\right)\right] \\
\times\ &\left[\hat{f}(q_i)-\hat{f}(q_j)\right]\frac{1}{\sqrt{N!}}\left[\sum_{\hat{P}_2}(-1)^{P_2}\hat{P}_2\left(\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\varphi_{k_i}(q_i)\cdots\varphi_{k_j}(q_j)\cdots\varphi_{k_N}(q_N)\right)\right]
\end{aligned} \tag{124}$$

在上式中调换自由度 q_i 和 q_j(即令 $q_i=q'_j,\ q_j=q'_i$，然后再令 $q'_j=q_j,\ q'_i=q_i$)，则我们得到

$$\begin{aligned}
& M \equiv \langle\psi_{k'_1,k'_2,\cdots\cdots,k'_N}|\left[\hat{f}(q_i)-\hat{f}(q_j)\right]|\psi_{k_1,k_2,\cdots\cdots,k_N}\rangle \\
= & \frac{1}{N!}\int dq_1\cdots dq_N\left[\sum_{\hat{P}_1}(-1)^{P_1}\hat{P}_1(i,\ j)\left(\varphi^*_{k'_1}(q_1)\cdots\varphi^*_{k'_i}(q_i)\cdots\varphi^*_{k'_j}(q_j)\cdots\varphi^*_{k'_N}(q_N)\right)\right] \\
\times & \left[\hat{f}(q_j)-\hat{f}(q_i)\right]\left[\sum_{\hat{P}_2}(-1)^{P_2}\hat{P}_2(i,\ j)\left(\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\varphi_{k_i}(q_i)\cdots\varphi_{k_j}(q_j)\cdots\varphi_{k_N}(q_N)\right)\right] \\
= & (-1)\frac{1}{N!}\int dq_1\cdots dq_N\left[\sum_{\hat{\widetilde{P}}_1}(-1)^{\widetilde{P}_1}\hat{\widetilde{P}}_1\left(\varphi^*_{k'_1}(q_1)\cdots\varphi^*_{k'_i}(q_i)\cdots\varphi^*_{k'_j}(q_j)\cdots\varphi^*_{k'_N}(q_N)\right)\right] \\
\times & \left[\hat{f}(q_i)-\hat{f}(q_j)\right]\left[\sum_{\hat{\widetilde{P}}_2}(-1)^{\widetilde{P}_2}\hat{\widetilde{P}}_2\left(\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\varphi_{k_i}(q_i)\cdots\varphi_{k_j}(q_j)\cdots\varphi_{k_N}(q_N)\right)\right] \\
= & -\langle\psi_{k'_1,k'_2,\cdots\cdots,k'_N}|\left[\hat{f}(q_i)-\hat{f}(q_j)\right]|\psi_{k_1,k_2,\cdots\cdots,k_N}\rangle \\
= & -M. \qquad (125)
\end{aligned}$$

由此我们得到 $M\equiv 0$ 。换句话说，等式

$$\langle\psi_{k'_1,k'_2,\cdots\cdots,k'_N}|\hat{f}(q_i)|\psi_{k_1,k_2,\cdots\cdots,k_N}\rangle=\langle\psi_{k'_1,k'_2,\cdots\cdots,k'_N}|\hat{f}(q_j)|\psi_{k_1,k_2,\cdots\cdots,k_N}\rangle \qquad (126)$$

对于任何一对自由度 q_i 和 q_j 都成立。

下面我们要验证，在粒子数表象中， $\hat{F}$ 可以被写作

$$\hat{F}=\sum_{\alpha,\beta}f_{\alpha\beta}\hat{a}^\dagger_\alpha\hat{a}_\beta. \qquad (127)$$

这里

$$f_{\alpha\beta}=\langle\varphi_\alpha|\hat{f}|\varphi_\beta\rangle=\int dq\,\varphi^*_\alpha(q)\hat{f}(q)\varphi_\beta(q). \qquad (128)$$

对于单体算符，只可能有两种非零矩阵元。一种是

$$\left(\psi_{n_{k_1},n_{k_2},\cdots,n_{k_N}},\ \hat{F}\psi_{n_{k_1},n_{k_2},\cdots,n_{k_N}}\right)=N\left(\psi_{n_{k_1},n_{k_2},\cdots,n_{k_N}},\ \hat{f}(q_1)\psi_{n_{k_1},n_{k_2},\cdots,n_{k_N}}\right), \qquad (129)$$

称之为对角元。另外一种是

$$\begin{aligned}
& \left(\psi_{n_{k_1},\cdots,n_{k_i}+1,\cdots,n_{k_k}-1,\cdots},\ \hat{F}\psi_{n_{k_1},n_{k_2},\cdots,n_{k_i}\cdots,n_{k_k}\cdots}\right) \\
= & N\left(\psi_{n_{k_1},\cdots,n_{k_i}+1,\cdots,n_{k_k}-1,\cdots},\ \hat{f}(q_1)\psi_{n_{k_1},n_{k_2},\cdots,n_{k_i}\cdots,n_{k_k}\cdots}\right). \qquad (130)
\end{aligned}$$

称之为非对角元。这是由于，在第一种情况下，$\left(\psi_{n_{k_1},n_{k_2},\cdots,n_{k_N}},\ \hat{f}(q_1)\psi_{n_{k_1},n_{k_2},\cdots,n_{k_N}}\right)$ 可以表示为 $\int dq_1\,\varphi_{k_k}^*(q_1)\hat{f}(q_1)\varphi_{k_k}(q_1)$ 与两两配对的积分 $\int dq_i\,\varphi_{k_s}^*(q_i)\varphi_{k_s}(q_i)=1$ 的乘积。而在第二种情况中，矩阵元 $\left(\psi_{n_{k_1},\cdots,n_{k_i}+1,\cdots,n_{k_k}-1,\cdots},\ \hat{F}\psi_{n_{k_1},n_{k_2},\cdots,n_{k_i}\cdots,n_{k_k}\cdots}\right)$ 可改写为积分 $\int dq_1\,\varphi_{k_i}^*(q_1)\hat{f}(q_1)\varphi_{k_k}(q_1)$ 与这样一些配对积分的乘积。它们可能非零。其它的矩阵元，例如

$$\left(\psi_{n_{k_1},\cdots,n_{k_i}+2,\cdots,n_{k_k}-2,\cdots},\ \hat{f}(q_1)\psi_{n_{k_1},n_{k_2},\cdots,n_{k_i}\cdots,n_{k_k}\cdots}\right) \tag{131}$$

都只能恒为零。

这里，我们仅考虑第二种情况的计算。有关第一个积分的计算可以在教科书 151 页上找到。从定义出发，我们有

$$\begin{aligned}
&\left(\psi_{n_{k_1},\cdots,n_{k_i}+1,\cdots,n_{k_k}-1,\cdots},\ \hat{f}(q_1)\psi_{n_{k_1},n_{k_2},\cdots,n_{k_i}\cdots,n_{k_k}\cdots}\right)\\
=\ &\sqrt{\frac{n_{k_1}!\cdots(n_{k_i}+1)!\cdots(n_{k_k}-1)!\cdots}{N!}}\sqrt{\frac{n_{k_1}!\cdots n_{k_i}!\cdots n_{k_k}!\cdots}{N!}}\\
\times\ &\sum_{\{\hat{P}\}}\sum_{\{\hat{P}'\}}\int dq_1\cdots dq_N\,\overbrace{\varphi_{k_1}^*(q_{P'(1)})\cdots}^{n_{k_1}}\cdots\overbrace{\varphi_{k_i}^*(q_{P'(i)})\cdots}^{n_{k_i}+1}\cdots\overbrace{\varphi_{k_k}^*(q_{P'(k)})\cdots}^{n_{k_k}-1}\cdots\\
\times\ &\hat{f}(q_1)\,\underbrace{\varphi_{k_1}(q_{P(1)})\cdots}_{n_{k_1}}\cdots\underbrace{\varphi_{k_i}(q_{P(i)})\cdots}_{n_{k_i}}\cdots\underbrace{\varphi_{k_k}(q_{P(k)})\cdots}_{n_{k_k}}\cdots.
\end{aligned} \tag{132}$$

显然，只有满足下面两个条件的项，才可能非零。

(1) q_1 同时出现在 $\varphi_{k_i}^*$ 中和 φ_{k_k} 中；

(2) 其余的坐标必须同时出现在相应的各组粒子波函数中。例如，若 q_2 出现在 $\varphi_{k_1}^*$ 中，则它必须也出现在 φ_{k_1} 中。

这样，我们可以把上式简化为

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{n_{k_1}!\cdots\boxed{n_{k_i}}\cdots\boxed{n_{k_k}}\cdots n_{k_N}!}{N!}\right)\sqrt{(n_{k_i}+1)!n_{k_i}!(n_{k_k}-1)!n_{k_k}!}\\
\times\ &\sum_{\{\hat{P}\}}\int dq_1\,\varphi_{k_i}^*(q_1)\hat{f}(q_1)\varphi_{k_k}(q_1)\int dq_2\cdots dq_N\\
\times\ &\left(\overbrace{\varphi_{k_1}^*(q_{P(1)})\cdots}^{n_{k_1}}\cdots\overbrace{\varphi_{k_i}^*(q_{P(i)})\cdots}^{n_{k_i}}\cdots\overbrace{\varphi_{k_k}^*(q_{P(k)})\cdots}^{n_{k_k}-1}\right.
\end{aligned}$$

$$\times \left(\overbrace{\varphi_{k_1}(q_{P(1)})\cdots}^{n_{k_1}} \cdots \overbrace{\varphi_{k_i}(q_{P(i)})\cdots}^{n_{k_i}} \cdots \overbrace{\varphi_{k_k}(q_{P(k)})\cdots}^{n_{k_k}-1} \right). \tag{133}$$

这样，就保证了剩余的单粒子波函数可以两两配对，并给出非零的积分值。所有满足这些条件的置换的全体个数为

$$\frac{(N-1)!}{n_{k_1}!\cdots n_{k_i}!\cdots(n_{k_k}-1)!\cdots n_{k_N}!} \tag{134}$$

因此，我们最后得到

$$\begin{aligned} & \left(\frac{n_{k_1}!\cdots \boxed{n_{k_i}}\cdots \boxed{n_{k_k}}\cdots n_{k_N}!}{N!}\right)\sqrt{(n_{k_i}+1)!n_{k_i}!(n_{k_k}-1)!n_{k_k}!}\, f_{ik} \\ \times & \frac{(N-1)!}{n_{k_1}!\cdots n_{k_i}!\cdots(n_{k_k}-1)!\cdots n_{k_N}!} = \frac{1}{N}\sqrt{(n_{k_i}+1)n_{k_k}}\, f_{ik}. \end{aligned} \tag{135}$$

而单粒子算符 $\hat{F}$ 在波函数表象中的矩阵元可被最后写作

$$\begin{aligned} & \left(\psi_{n_{k_1},\cdots,n_{k_i}+1,\cdots,n_{k_k}-1,\cdots},\ \hat{F}\psi_{n_{k_1},n_{k_2},\cdots,n_{k_i}\cdots,n_{k_k}\cdots}\right) \\ = & N\left(\psi_{n_{k_1},\cdots,n_{k_i}+1,\cdots,n_{k_k}-1,\cdots},\ \hat{f}(q_1)\psi_{n_{k_1},n_{k_2},\cdots,n_{k_i}\cdots,n_{k_k}\cdots}\right) \\ = & N\cdot\frac{1}{N}\sqrt{(n_{k_i}+1)n_{k_k}}\, f_{ik} = \sqrt{(n_{k_i}+1)n_{k_k}}\, f_{ik}. \end{aligned} \tag{136}$$

我们现在证明，在粒子数表象中，利用上面定义的单粒子算符，可以得到同样的结果。也就是说，我们有

$$\begin{aligned} & \langle\cdots n_{k_k}-1,\cdots,n_{k_i}+1,\cdots|\hat{F}|\cdots,n_{k_i},\cdots,n_{k_k},\cdots\rangle \\ = & \left\langle\cdots n_{k_k}-1,\cdots,n_{k_i}+1,\cdots\left|\sum_{\alpha,\beta} f_{\alpha\beta}\underline{\underline{\hat{a}^\dagger_\alpha}}\ \underline{\hat{a}_\beta}\right|\cdots,\underline{\underline{n_{k_i}}}\cdots,\underline{n_{k_k}},\cdots\right\rangle \\ = & \sum_{\alpha,\beta} f_{\alpha\beta}\sqrt{(n_{k_i}+1)n_{k_k}}\,\delta_{\alpha,k_i}\,\delta_{\beta,k_k} = f_{ik}\sqrt{(n_{k_i}+1)n_{k_k}}. \end{aligned} \tag{137}$$

所得的结果是完全一样的。

1.3.2 二体算符

当讨论粒子之间的相互作用是，我们会遇到所谓两体算符

$$\hat{G} = \sum_{a<b}\hat{g}(a,b) \tag{138}$$

例如，电子之间的相互作用势

$$V(q_1, q_2, \cdots, q_N) = \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} = \frac{1}{2} \sum_{i,\, j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \tag{139}$$

即是这样一种两体算符。下面，我们要证明，在粒子数表象中，两体算符总可以写成如下的形式

$$\hat{G} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha'\beta'} \sum_{\alpha\beta} g_{\alpha'\beta',\alpha\beta} \hat{a}^\dagger_{\alpha'} \hat{a}^\dagger_{\beta'} \hat{a}_\beta \hat{a}_\alpha. \tag{140}$$

这里

$$g_{\alpha'\beta',\alpha\beta} = \int dq_1 dq_2\, \varphi^*_{\alpha'}(q_1) \varphi^*_{\beta'}(q_2) \hat{g}(q_1, q_2) \varphi_\alpha(q_1) \varphi_\beta(q_2). \tag{141}$$

在教科书里，分别讨论了几种情况。这里，由于时间所限，我们将仅仅讨论两种情况，即对角元和一种特殊非对角元的计算。

首先计算对角元。由于波函数的交换对称性，我们有

$$\begin{aligned}
\left(\psi_{n_{k_1}\cdots n_{k_N}},\, \hat{G}\psi_{n_{k_1}\cdots n_{k_N}}\right) &= \sum_{i<j} \left(\psi_{n_{k_1}\cdots n_{k_N}},\, \hat{g}(q_i,\, q_j)\psi_{n_{k_1}\cdots n_{k_N}}\right) \\
&= C_N^2 \left(\psi_{n_{k_1}\cdots n_{k_N}},\, \hat{g}(q_1, q_2)\psi_{n_{k_1}\cdots n_{k_N}}\right).
\end{aligned} \tag{142}$$

再利用波函数的定义，我们有

$$\begin{aligned}
&\frac{N(N-1)}{2} \left(\psi_{n_{k_1}\cdots n_{k_N}},\, \hat{g}(q_1, q_2)\psi_{n_{k_1}\cdots n_{k_N}}\right) = \frac{N(N-1)}{2} \left(\frac{n_{k_1}! \cdots n_{k_N}!}{N!}\right) \\
&\times \sum_{\{\hat{P}'\}} \sum_{\{\hat{P}\}} \int dq_1 \cdots dq_N\, \overbrace{\varphi^*_{k_1}(q_{P'(1)}) \cdots}^{n_{k_1}} \cdots \overbrace{\cdots \varphi^*_{k_N}(q_{P'(N)})}^{n_{k_N}} \\
&\times \hat{g}(q_1,\, q_2) \overbrace{\varphi_{k_1}(q_{P(1)}) \cdots}^{n_{k_1}} \cdots \overbrace{\cdots \varphi_{k_N}(q_{P(N)})}^{n_{k_N}}.
\end{aligned} \tag{143}$$

注意， q_1 和 q_2 在两个置换中，既可能以

$$\begin{aligned}
&\varphi^*_{k_i}(q_1)\varphi^*_{k_j}(q_2)\hat{g}(q_1, q_2)\varphi_{k_i}(q_1)\varphi_{k_j}(q_2), \quad \varphi^*_{k_i}(q_1)\varphi^*_{k_j}(q_2)\hat{g}(q_1, q_2)\varphi_{k_i}(q_2)\varphi_{k_j}(q_1), \\
&\varphi^*_{k_i}(q_2)\varphi^*_{k_j}(q_1)\hat{g}(q_1, q_2)\varphi_{k_i}(q_1)\varphi_{k_j}(q_2), \quad \varphi^*_{k_i}(q_2)\varphi^*_{k_j}(q_1)\hat{g}(q_1, q_2)\varphi_{k_i}(q_2)\varphi_{k_j}(q_1)
\end{aligned} \tag{144}$$

的形式出现，也可能以

$$\varphi^*_{k_i}(q_1)\varphi^*_{k_i}(q_2)\hat{g}(q_1, q_2)\varphi_{k_i}(q_1)\varphi_{k_i}(q_2) \tag{145}$$

的形式出现。其余的坐标在积分值不为零的要求下，必须同时出现在剩余的 k 值相同的单粒子波函数里。这样，我们要求 $P'(l) = P(l)$ 对于 $l = 3,\ 4,\ \cdots$ 成立。在第一种情况下，我们有

$$\begin{aligned}
G_1 &= \sum_{(i,j)} \frac{N(N-1)}{2} \left(\frac{n_{k_1}! \cdots n_{k_N}!}{N!}\right) \frac{(N-2)!}{n_{k_1}! \cdots (n_{k_i}-1)! \cdots (n_{k_j}-1)! \cdots n_{k_N}!} \\
&\times \int dq_1 dq_2 \, \Big(\varphi^*_{k_i}(q_1)\varphi^*_{k_j}(q_2)\hat{g}(q_1,q_2)\varphi_{k_i}(q_1)\varphi_{k_j}(q_2) \\
&+ \varphi^*_{k_i}(q_1)\varphi^*_{k_j}(q_2)\hat{g}(q_1,q_2)\varphi_{k_i}(q_2)\varphi_{k_j}(q_1) \\
&+ \varphi^*_{k_i}(q_2)\varphi^*_{k_j}(q_1)\hat{g}(q_1,q_2)\varphi_{k_i}(q_1)\varphi_{k_j}(q_2) + \varphi^*_{k_i}(q_2)\varphi^*_{k_j}(q_1)\hat{g}(q_1,q_2)\varphi_{k_i}(q_2)\varphi_{k_j}(q_1)\Big) \\
&= \sum_{(i,j)} n_{k_i} n_{k_j} \left(g_{ij,ij} + g_{ij,ji}\right). \qquad (146)
\end{aligned}$$

这里，$(i,j) = (j,i)$ 代表一对不分次序选定的单粒子态。而

$$g_{ij,ij} = \int dq_1 dq_2 \, \varphi^*_{k_i}(q_1)\varphi^*_{k_j}(q_2)\hat{g}(q_1,q_2)\varphi_{k_i}(q_1)\varphi_{k_j}(q_2) \qquad (147)$$

称为直接积分，

$$g_{ij,ji} = \int dq_1 dq_2 \, \varphi^*_{k_i}(q_1)\varphi^*_{k_j}(q_2)\hat{g}(q_1,q_2)\varphi_{k_j}(q_1)\varphi_{k_i}(q_2) \qquad (148)$$

则称为交换积分。同理，当 q_1 和 q_2 出现在相同的波函数中时，我们有：

$$\begin{aligned}
G_2 &= \frac{N(N-1)}{2} \left(\frac{n_{k_1}! \cdots n_{k_N}!}{N!}\right) \sum_i \frac{(N-2)!}{n_{k_1}! \cdots (n_{k_i}-2)! \cdots n_{k_N}!} g_{ii,ii} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} n_{k_i}(n_{k_i}-1) g_{ii,ii}. \qquad (149)
\end{aligned}$$

这里，

$$g_{ii,ii} = \int dq_1 dq_2 \, \varphi^*_{k_i}(q_1)\varphi^*_{k_i}(q_2)\hat{g}(q_1,q_2)\varphi_{k_i}(q_1)\varphi_{k_i}(q_2). \qquad (150)$$

因此，$\hat{G}$ 算符的对角元可以最后写成

$$\begin{aligned}
&\left(\psi_{n_{k_1}\cdots n_{k_N}}, \hat{G}\psi_{n_{k_1}\cdots n_{k_N}}\right) = G_1 + G_2 \\
&= \sum_{(i,j)} n_{k_i} n_{k_j} \left(g_{ij,ij} + g_{ij,ji}\right) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} n_{k_i}(n_{k_i}-1) g_{ii,ii}. \qquad (151)
\end{aligned}$$

现在，让我们考察算符

$$\hat{G}=\frac{1}{2}\sum_{\alpha'\beta'}\sum_{\alpha\beta}g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\hat{a}^{\dagger}_{\alpha'}\hat{a}^{\dagger}_{\beta'}\hat{a}_{\beta}\hat{a}_{\alpha}. \tag{152}$$

它在粒子数表象中的对角矩阵元为

$$\begin{aligned}
&\langle n_{k_N},\cdots,n_{k_1}|\hat{G}|n_{k_1},\cdots,n_{k_N}\rangle\\
=\;&\frac{1}{2}\sum_{\alpha'\beta'}\sum_{\alpha\beta}\sum_{(i,j)}g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\langle n_{k_N},\cdots,n_{k_1}|\hat{a}^{\dagger}_{\alpha'}\hat{a}^{\dagger}_{\beta'}\underline{\underline{\hat{a}_{\beta}}}\;\underline{\hat{a}_{\alpha}}|n_{k_1}\cdots,\underline{\underline{n_{k_i}}}\cdots,\underline{n_{k_j}},\cdots n_{k_N}\rangle\\
+\;&\frac{1}{2}\sum_{\alpha'\beta'}\sum_{\alpha\beta}\sum_{(i,j)}g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\langle n_{k_N},\cdots,n_{k_1}|\hat{a}^{\dagger}_{\alpha'}\hat{a}^{\dagger}_{\beta'}\underbrace{\hat{a}_{\beta}\,\overbrace{\hat{a}_{\alpha}|n_{k_1},\cdots,n_{k_i}},\cdots,n_{k_j}},\cdots n_{k_N}\rangle\\
+\;&\frac{1}{2}\sum_{\alpha'\beta'}\sum_{\alpha\beta}\sum_{i=1}^{N}g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\langle n_{k_N},\cdots,n_{k_1}|\hat{a}^{\dagger}_{\alpha'}\hat{a}^{\dagger}_{\beta'}\underbrace{\hat{a}_{\beta}\,\overbrace{\hat{a}_{\alpha}|n_{k_1},\cdots,n_{k_i}}},\cdots n_{k_N}\rangle\\
=\;&\frac{1}{2}\sum_{\alpha'\beta'}\sum_{\alpha\beta}\sum_{(i,j)}g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\delta_{\alpha j}\delta_{\beta i}\sqrt{n_{k_i}n_{k_j}}\\
\times\;&\langle n_{k_N},\cdots,n_{k_1}|\underline{\underline{\hat{a}^{\dagger}_{\alpha'}}}\;\underline{\hat{a}^{\dagger}_{\beta'}}|n_{k_1},\cdots,\underline{\underline{n_{k_i}-1}},\cdots,\underline{n_{k_j}-1},\cdots n_{k_N}\rangle\\
+\;&\frac{1}{2}\sum_{\alpha'\beta'}\sum_{\alpha\beta}\sum_{(i,j)}g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\delta_{\alpha i}\delta_{\beta j}\sqrt{n_{k_i}n_{k_j}}\\
\times\;&\langle n_{k_N},\cdots,n_{k_1}|\underline{\underline{\hat{a}^{\dagger}_{\alpha'}}}\;\underline{\hat{a}^{\dagger}_{\beta'}}|n_{k_1},\cdots,\underline{\underline{n_{k_i}-1}},\cdots,\underline{n_{k_j}-1},\cdots n_{k_N}\rangle\\
+\;&\frac{1}{2}\sum_{\alpha'\beta'}\sum_{\alpha\beta}\sum_{(i,j)}g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\delta_{\alpha j}\delta_{\beta i}\sqrt{n_{k_i}n_{k_j}}\\
\times\;&\langle n_{k_N},\cdots,n_{k_1}|\underbrace{\hat{a}^{\dagger}_{\alpha'}\,\overbrace{\hat{a}^{\dagger}_{\beta'}|n_{k_1},\cdots,n_{k_i}-1},\cdots,n_{k_j}-1},\cdots n_{k_N}\rangle\\
+\;&\frac{1}{2}\sum_{\alpha'\beta'}\sum_{\alpha\beta}\sum_{(i,j)}g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\delta_{\alpha i}\delta_{\beta j}\sqrt{n_{k_i}n_{k_j}}\\
\times\;&\langle n_{k_N},\cdots,n_{k_1}|\underbrace{\hat{a}^{\dagger}_{\alpha'}\,\overbrace{\hat{a}^{\dagger}_{\beta'}|n_{k_1},\cdots,n_{k_i}-1},\cdots,n_{k_j}-1},\cdots n_{k_N}\rangle\\
+\;&\frac{1}{2}\sum_{\alpha'\beta'}\sum_{\alpha\beta}\sum_{i=1}^{N}g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\delta_{\alpha i}\delta_{\beta i}\sqrt{n_{k_i}(n_{k_i}-1)}\langle n_{k_N},\cdots,n_{k_1}|\underbrace{\hat{a}^{\dagger}_{\alpha'}\,\overbrace{\hat{a}^{\dagger}_{\beta'}|\cdots,n_{k_i}-2}},\cdots\rangle\\
=\;&\frac{1}{2}\sum_{\alpha'\beta'}\sum_{\alpha\beta}\sum_{(i,j)}g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\delta_{\alpha,j}\delta_{\beta,i}\delta_{\alpha',i}\delta_{\beta',j}\sqrt{n_{k_i}n_{k_j}}\cdot\sqrt{n_{k_i}n_{k_j}}\\
+\;&\frac{1}{2}\sum_{\alpha'\beta'}\sum_{\alpha\beta}\sum_{(i,j)}g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\delta_{\alpha,i}\delta_{\beta,j}\delta_{\alpha',i}\delta_{\beta',j}\sqrt{n_{k_i}n_{k_j}}\cdot\sqrt{n_{k_i}n_{k_j}}
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&+\ \frac{1}{2}\sum_{\alpha'\beta'}\sum_{\alpha\beta}\sum_{(i,j)} g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\delta_{\alpha,j}\delta_{\beta,i}\delta_{\alpha',j}\delta_{\beta',i}\sqrt{n_{k_i}n_{k_j}}\cdot\sqrt{n_{k_i}n_{k_j}}\\
&+\ \frac{1}{2}\sum_{\alpha'\beta'}\sum_{\alpha\beta}\sum_{(i,j)} g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\delta_{\alpha,i}\delta_{\beta,j}\delta_{\alpha',j}\delta_{\beta',i}\sqrt{n_{k_i}n_{k_j}}\cdot\sqrt{n_{k_i}n_{k_j}}\\
&+\ \frac{1}{2}\sum_{\alpha'\beta'}\sum_{\alpha\beta}\sum_{i=1}^{N} g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\delta_{\alpha,i}\delta_{\beta,i}\delta_{\alpha',i}\delta_{\beta',i}\sqrt{n_{k_i}(n_{k_i}-1)}\cdot\sqrt{n_{k_i}(n_{k_i}-1)}\\
&=\ \sum_{(i,j)} n_{k_i}n_{k_j}\left(g_{ij,ij}+g_{ij,ji}\right)+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} n_{k_i}(n_{k_i}-1)g_{ii,ii}. \qquad (153)
\end{aligned}
$$

因此，在两种表象中给出的 $\hat{G}$ 的对角矩阵元时完全一样的。

下面，再让我们来考察一下 $\hat{G}$ 的非对角矩阵元。大致有下面几种非零矩阵元

$$(n_{k_i}, n_{k_j}, n_{k_k}, n_{k_l}) \longrightarrow (n_{k_i}-1, n_{k_j}-1, n_{k_k}+1, n_{k_l}+1), \qquad (154)$$

$$(n_{k_i}, n_{k_j}, n_{k_k}, n_{k_l}) \longrightarrow (n_{k_i}-1, n_{k_j}-1, n_{k_k}+2, n_{k_l}), \qquad (155)$$

$$(n_{k_i}, n_{k_j}, n_{k_k}, n_{k_l}) \longrightarrow (n_{k_i}-2, n_{k_j}, n_{k_k}+2, n_{k_l}), \qquad (156)$$

$$(n_{k_i}, n_{k_j}, n_{k_k}, n_{k_l}) \longrightarrow (n_{k_i}, n_{k_j}-1, n_{k_k}+1, n_{k_l}). \qquad (157)$$

这里，我们仅考察 $(n_{k_i}, n_{k_j}, n_{k_k}, n_{k_l}) \longrightarrow (n_{k_i}-1, n_{k_j}-1, n_{k_k}+1, n_{k_l}+1)$ 的情况。

在波函数表象中，我们有：

$$
\begin{aligned}
&G_{(n_{k_N},\cdots,n_{k_i}-1,\cdots,n_{k_j}-1,\cdots,n_{k_k}+1,\cdots,n_{k_l}+1,\cdots,n_{k_1}),(n_{k_1}\cdots n_{k_N})}\\
=\ &\frac{N(N-1)}{2}\int dq_1\cdots dq_N\frac{n_{k_1}!\cdots\boxed{n_{k_i}}\cdots\boxed{n_{k_j}}\cdots\boxed{n_{k_k}}\cdots\boxed{n_{k_l}}\cdots n_{k_N}!}{N!}\\
\times\ &\sqrt{n_{k_i}!(n_{k_i}-1)!n_{k_j}!(n_{k_j}-1)!}\sqrt{n_{k_k}!(n_{k_k}+1)!n_{k_l}!(n_{k_l}+1)!}\\
\times\ &\sum_{\{\hat{P}\}}\sum_{\{\hat{P}'\}}\hat{P}\left(\varphi^*_{k_1}(q_1)\cdots\cdots\right)\hat{g}(q_1,\ q_2)\hat{P}'\left(\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\cdots\right). \qquad (158)
\end{aligned}
$$

只有粒子 q_1 与 q_2 在初态中处于单粒子态 φ_{k_i} 与 φ_{k_j}，而在末态中处于 φ_{k_k} 与 φ_{k_l} 时，矩阵元才可能非零。这样的项共有

$$\frac{(N-2)!}{n_{k_k}!n_{k_l}!(n_{k_i}-1)!(n_{k_j}-1)!}\cdot\frac{1}{n_{k_1}!\cdots\boxed{n_{k_i}}\cdots\boxed{n_{k_j}}\cdots\boxed{n_{k_k}}\cdots\boxed{n_{k_l}}\cdots n_{k_N}!} \qquad (159)$$

项，而每一项给出相同的贡献

$$\begin{aligned}&\int dq_1 dq_2\ \left[\varphi^*_{k_k}(q_1)\varphi^*_{k_l}(q_2)+\varphi^*_{k_k}(q_2)\varphi^*_{k_l}(q_1)\right] g(q_1,\ q_2)\\ \times\ &\left[\varphi_{k_i}(q_1)\varphi_{k_j}(q_2)+\varphi_{k_i}(q_2)\varphi_{k_j}(q_1)\right]=2\left[\langle kl|\hat{g}|ij\rangle+\langle kl|\hat{g}|ji\rangle\right].\end{aligned}\tag{160}$$

代入非对角元的表达式后，我们有

$$\begin{aligned}&G_{(n_{k_N},\cdots,n_{k_i}-1,\cdots,n_{k_j}-1,\cdots,n_{k_k}+1,\cdots,n_{k_l}+1,\cdots,n_{k_1}),(n_{k_1}\cdots n_{k_N})}\\ =\ &\frac{N(N-1)}{2}\frac{n_{k_1}!\cdots\boxed{n_{k_i}}\cdots\boxed{n_{k_j}}\cdots\boxed{n_{k_k}}\cdots\boxed{n_{k_l}}\cdots n_{k_N}!}{N!}\\ \times\ &\sqrt{n_{k_i}!(n_{k_i}-1)!n_{k_j}!(n_{k_j}-1)!}\sqrt{n_{k_k}!(n_{k_k}+1)!n_{k_l}!(n_{k_l}+1)!}\\ \times\ &\frac{(N-2)!}{n_{k_k}!n_{k_l}!(n_{k_i}-1)!(n_{k_j}-1)!}\frac{1}{n_{k_1}!\cdots\boxed{n_{k_i}}\cdots\boxed{n_{k_j}}\cdots\boxed{n_{k_k}}\cdots\boxed{n_{k_l}}\cdots n_{k_N}!}\\ \times\ &2\left(g_{kl,ij}+g_{kl,ji}\right)\\ =\ &\sqrt{n_{k_i}n_{k_j}(n_{k_k}+1)(n_{k_l}+1)}\left(g_{kl,ij}+g_{kl,ji}\right).\end{aligned}\tag{161}$$

而在粒子数表象中，我们有

$$\begin{aligned}&\langle n_{k_N},\cdots,n_{k_l}+1,\cdots,n_{k_k}+1,\cdots,n_{k_j}-1,\cdots,n_{k_i}-1,\cdots,n_{k_1}|\hat{G}|n_{k_1}\cdots n_{k_N}\rangle\\ =\ &\frac{1}{2}\sum_{\alpha'\beta'}\sum_{\alpha\beta}g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\langle\cdots,n_{k_l}+1,\cdots,n_{k_k}+1,\cdots,n_{k_j}-1,\cdots,n_{k_i}-1,\\ \cdots\ &|\hat{a}^\dagger_{\alpha'}\hat{a}^\dagger_{\beta'}\hat{a}_\beta\hat{a}_\alpha|\cdots,n_{k_i},\cdots,n_{k_j},\cdots,n_{k_k},\cdots,n_{k_l},\cdots\rangle\\ =\ &\frac{1}{2}\sum_{\alpha'\beta'}\sum_{\alpha\beta}g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\langle\cdots,n_{k_l}+1,\cdots,n_{k_k}+1,\cdots,n_{k_j}-1,\cdots,n_{k_i}-1,\\ \cdots\ &|\hat{a}^\dagger_{\alpha'}\hat{a}^\dagger_{\beta'}|n_{k_1},\cdots,n_{k_i}-1,\cdots,n_{k_j}-1,\cdots,n_{k_k},\cdots,n_{k_l},\cdots\rangle\\ \times\ &\sqrt{n_{k_i}n_{k_j}}(\delta_{\alpha,i}\delta_{\beta,j}+\delta_{\alpha,j}\delta_{\beta,i})\\ =\ &\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}\sum_{\alpha'\beta'}\sqrt{n_{k_i}n_{k_j}}g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}(\delta_{\alpha,i}\delta_{\beta,j}+\delta_{\alpha,j}\delta_{\beta,i})\\ \times\ &\sqrt{(n_{k_k}+1)(n_{k_l}+1)}(\delta_{\alpha',l}\delta_{\beta',k}+\delta_{\alpha',k}\delta_{\beta',l})\\ =\ &\frac{1}{2}\left(g_{lk,ij}+g_{kl,ij}+g_{lk,ji}+g_{kl,ij}\right)\sqrt{n_{k_i}n_{k_j}(n_{k_k}+1)(n_{k_l}+1)}\\ =\ &\sqrt{n_{k_i}n_{k_j}(n_{k_k}+1)(n_{k_l}+1)}\left(g_{kl,ij}+g_{kl,ji}\right).\end{aligned}\tag{162}$$

换句话说，这两种表象给出了 $\hat{G}$ 的相同的矩阵元。

$ 1.4 费米子单体和二体算符的表达式

在讨论完玻色子算符的表示之后，我们不难研究费米子算符的表示。结论是，单体和二体费米子算符亦可被写作

$$\hat{F} = \sum_{\alpha,\beta} f_{\alpha\beta}\hat{C}^\dagger_\alpha \hat{C}_\beta, \quad f_{\alpha\beta} = \int dq_1\, \psi^*_\alpha(q_1)\hat{f}(q_1)\psi_\beta(q_1), \tag{163}$$

以及

$$\hat{G} = \frac{1}{2}\sum_{\alpha',\beta'}\sum_{\alpha,\beta} g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\hat{C}^\dagger_{\alpha'}\hat{C}^\dagger_{\beta'}\hat{C}_\beta\hat{C}_\alpha. \tag{164}$$

其中，

$$g_{\alpha'\beta',\alpha\beta} \equiv \int dq_1 dq_2\, \psi^*_{\alpha'}(q_1)\psi^*_{\beta'}(q_2)g(q_1,q_2)\psi_\alpha(q_1)\psi_\beta(q_2). \tag{165}$$

自然，这里的 $\hat{C}^\dagger_\alpha$ 和 $\hat{C}_\beta$ 等算符应满足反对易关系。

证明的方法同上面一样。我们需要分别考虑算符 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 在两种不同表象中的矩阵元。首先考虑单体算符（这里我们只考虑其非对角元的计算）。

由于 $\hat{F}$ 是一个单体算符，初态和末态之间最多差一个单粒子态，否则矩阵元为零。这种矩阵元的一般形式为

$$\begin{aligned}
& \left(\psi_{\cdots,1_j,\cdots,0_k,\cdots},\ \hat{F}\psi_{\cdots,0_j,\cdots,1_k,\cdots}\right) \\
= \;& N\left(\psi_{\cdots,1_j,\cdots,0_k,\cdots},\ \hat{f}(q_1)\psi_{\cdots,0_j,\cdots,1_k,\cdots}\right) \\
= \;& N\frac{1}{N!}\sum_{\hat{P}}\sum_{\hat{P}'}(-1)^{\hat{P}}(-1)^{\hat{P}'}\int dq_1\cdots dq_N \\
\times \;& \hat{P}\left(\cdots\varphi^*_{k_j}(q_j)\cdots\right)\hat{f}(q_1)\hat{P}'\left(\cdots\varphi_{k_k}(q_k)\cdots\right).
\end{aligned} \tag{166}$$

我们仅考虑不为零的项。这样的项应有形式

$$\begin{aligned}
& \int dq_1\cdots dq_N\, \varphi^*_{k_1}(q_\alpha)\cdots\varphi^*_{k_j}(q_1)\cdots\boxed{\varphi^*_{k_k}}\cdots\varphi^*_{k_N}(q_\lambda)\hat{f}(q_1) \\
\times \;& \varphi_{k_1}(q_\alpha)\cdots\boxed{\varphi_{k_j}}\cdots\varphi_{k_k}(q_1)\cdots\varphi_{k_N}(q_\lambda) \\
= \;& \int dq_1\varphi^*_{k_j}(q_1)\hat{f}(q_1)\varphi_{k_k}(q_1) \equiv f_{jk}.
\end{aligned} \tag{167}$$

注意，在其余的因子

$$\begin{aligned}
& \varphi^*_{k_1}(q_\alpha)\cdots\varphi^*_{k_{j-1}}(q_\beta)\varphi^*_{k_{j+1}}(q_\gamma)\cdots\varphi^*_{k_{k-1}}(q_\delta)\varphi^*_{k_{k+1}}(q_\epsilon)\cdots\varphi^*_{k_N}(q_\lambda) \\
& \varphi_{k_1}(q_\alpha)\cdots\varphi_{k_{j-1}}(q_\beta)\varphi_{k_{j+1}}(q_\gamma)\cdots\varphi_{k_{k-1}}(q_\delta)\varphi_{k_{k+1}}(q_\epsilon)\cdots\varphi_{k_N}(q_\lambda)
\end{aligned} \tag{168}$$

中，各个单粒子态中的自由度是两两对应的。我们唯一需要决定的是符号 $(-1)^{\hat{P}}(-1)^{\hat{P}'}$ 及这些非零项的个数。

为此，我们注意到 $(-1)^{\hat{P}'}$ 可以写作

$$(-1)^{\hat{P}'} = (-1)^{\hat{P}}(-1)^{\sum_{i=j+1}^{k-1} n_i}. \tag{169}$$

这是由于 $\hat{P}'$ 可以分解成下面的操作。首先，置换 $\hat{P}$ 将乘积

$$\varphi_{k_1}^*(q_1)\cdots\varphi_{k_{j-1}}^*(q_{j-1})\varphi_{k_j}^*(q_j)\varphi_{k_{j+1}}^*(q_{j+1})\cdots\varphi_{k_{k-1}}^*(q_{k-1})\varphi_{k_{k+1}}^*(q_k)\cdots\varphi_{k_N}^*(q_N) \tag{170}$$

以及

$$\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\varphi_{k_{j-1}}(q_{j-1})\varphi_{k_{j+1}}(q_j)\cdots\varphi_{k_{k-1}}(q_{k-2})\varphi_{k_k}(q_{k-1})\varphi_{k_{k+1}}(q_k)\cdots\varphi_{k_N}(q_N) \tag{171}$$

中的自由度重新排列为

$$\begin{aligned}&\varphi_{k_1}^*(q_{P(1)})\cdots\varphi_{k_{j-1}}^*(q_{P(j-1)})\varphi_{k_j}^*(q_1)\varphi_{k_{j+1}}^*(q_{P(j+1)})\cdots\\&\varphi_{k_{k-1}}^*(q_{P(k-1)})\varphi_{k_{k+1}}^*(q_{P(k)})\cdots\varphi_{k_N}^*(q_{P(N)})\end{aligned} \tag{172}$$

以及

$$\begin{aligned}&\varphi_{k_1}(q_{P(1)})\cdots\varphi_{k_{j-1}}(q_{P(j-1)})\varphi_{k_{j+1}}(q_1)\cdots\\&\varphi_{k_{k-1}}(q_{P(k-2)})\varphi_{k_k}(q_{P(k-1)})\varphi_{k_{k+1}}(q_{P(k)})\cdots\varphi_{k_N}(q_{P(N)}).\end{aligned} \tag{173}$$

然后，我们再用连续相邻对换 $\hat{\tilde{P}}$ 将公式 (173) 中自由度 q_1 移至 $q_{P(k-1)}$ 的位置。而每一次对换给出一个因子 (-1) 。由于我们必须对换 $\sum_{i=j+1}^{k-1} n_i$ 次，因此我们得到

$$(-1)^{\hat{\tilde{P}}} = (-1)^{\sum_{i=j+1}^{k-1} n_i}. \tag{174}$$

显然，置换 $\hat{P}'$ 是 $\hat{P}$ 和 $\hat{\tilde{P}}$ 的乘积。因此，我们最后得到

$$(-1)^{\hat{P}'} = (-1)^{\hat{P}}(-1)^{\hat{\tilde{P}}} = (-1)^{\hat{P}}(-1)^{\sum_{i=j+1}^{k-1} n_i}. \tag{175}$$

现在，我们计算一下不为零的项的个数。固定 j 和 k 后，其余的 $N-1$ 个自由度可以进行配对全排列。因此，这些项的个数为 $(N-1)!$ 。故我们最后有

$$\begin{aligned}&\left(\psi_{\cdots,1_j,\cdots,0_k,\cdots},\ \hat{F}\psi_{\cdots,0_j,\cdots,1_k,\cdots}\right)\\=\ &N\frac{1}{N!}(N-1)!(-1)^{\sum_{i=j+1}^{k-1} n_i} f_{jk} = (-1)^{\sum_{i=j+1}^{k-1} n_i} f_{jk}.\end{aligned} \tag{176}$$

另一方面，在粒子数表象中，我们有：

$$
\begin{aligned}
& \langle\cdots,n_k=0,\cdots,n_j=1,\cdots|\hat{F}|\cdots,n_j=0,\cdots,n_k=1,\cdots\rangle \\
= & \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta}\langle\cdots,n_k=0,\cdots,n_j=1,\cdots|\hat{C}^\dagger_\alpha \underbrace{\hat{C}_\beta|\cdots,n_j=0,\cdots,n_k=1}, \cdots\rangle \\
= & \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta}\delta_{\beta k}(-1)^{\sum_{i=1}^{k-1} n_i}\,\langle\cdots,0_k,\cdots,1_j,\cdots|\overbrace{\hat{C}^\dagger_\alpha|\cdots,n_j=0},\cdots,n_k=0,\cdots\rangle \\
= & \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta}\delta_{\alpha j}\delta_{\beta k}(-1)^{\sum_{i=1}^{k-1} n_i}(-1)^{\sum_{i=1}^{j-1} n_i} \\
= & \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta}\delta_{\alpha j}\delta_{\beta k}(-1)^{\sum_{i=1}^{k-1} n_i}(-1)^{\sum_{i=1}^{j} n_i} \\
= & f_{jk}(-1)^{\sum_{i=j+1}^{k-1} n_i}.
\end{aligned} \tag{177}
$$

两者给出的结果完全相同。

下面，我们考虑二体算符。先来考察 $\hat{G}$ 的对角元。我们有

$$
\begin{aligned}
& G_{(n_{k_1},n_{k_2},\cdots)(n_{k_1},n_{k_2},\cdots)} = \left(\psi_{n_{k_1},n_{k_2},\cdots},\ \hat{G}\psi_{n_{k_1},n_{k_2},\cdots}\right) \\
= & \frac{N(N-1)}{2}\left(\psi_{n_{k_1},n_{k_2},\cdots},\ g(q_1,q_2)\psi_{n_{k_1},n_{k_2},\cdots}\right) \\
= & \frac{N(N-1)}{2N!}\sum_{\hat{P}}\sum_{\hat{P}'}(-1)^{\hat{P}}(-1)^{\hat{P}'}\int dq_1\cdots dq_N \\
\times & \hat{P}\left(\varphi^*_{k_1}(q_1)\cdots\varphi^*_{k_N}(q_N)\right)\ g(q_1,q_2)\,\hat{P}'\left(\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\varphi_{k_N}(q_N)\right).
\end{aligned} \tag{178}
$$

显然，非零的项或是

$$
\begin{aligned}
& \int dq_1\cdots dq_N\,\varphi^*_{k_1}(q_\alpha)\cdots\varphi^*_{k_k}(q_1)\cdots\varphi^*_{k_s}(q_2)\cdots\varphi^*_{k_N}(q_\lambda) \\
\times & \ g(q_1,q_2)\,\varphi_{k_1}(q_\alpha)\cdots\varphi_{k_k}(q_1)\cdots\varphi_{k_s}(q_2)\cdots\varphi_{k_N}(q_\lambda)
\end{aligned} \tag{179}
$$

的形式，或是

$$
\begin{aligned}
& \int dq_1\cdots dq_N\,\varphi^*_{k_1}(q_\alpha)\cdots\varphi^*_{k_k}(q_2)\cdots\varphi^*_{k_s}(q_1)\cdots\varphi^*_{k_N}(q_\lambda) \\
\times & \ g(q_1,q_2)\,\varphi_{k_1}(q_\alpha)\cdots\varphi_{k_k}(q_1)\cdots\varphi_{k_s}(q_2)\cdots\varphi_{k_N}(q_\lambda)
\end{aligned} \tag{180}
$$

的形式。前者可以写成

$$
g_{ks,ks} \equiv \int dq_1 dq_2\,\varphi^*_{k_k}(q_1)\varphi^*_{k_s}(q_2)g(q_1,q_2)\,\varphi_{k_k}(q_1)\varphi_{k_s}(q_2), \tag{181}
$$

而后者则为

$$\begin{aligned} g_{sk,ks} &\equiv \int dq_1 dq_2\, \varphi_{k_k}^*(q_2)\varphi_{k_s}^*(q_1) g(q_1,q_2)\, \varphi_{k_k}(q_1)\varphi_{k_s}(q_2) \\ &= \int dq_1 dq_2\, \varphi_{k_k}^*(q_1)\varphi_{k_s}^*(q_2) g(q_1,q_2)\, \varphi_{k_s}(q_1)\varphi_{k_k}(q_2) \\ &\equiv g_{ks,sk}. \end{aligned} \tag{182}$$

对于前者而言，我们有 $\hat{P}' = \hat{P}$ 。因此 $(-1)^{\hat{P}}(-1)^{\hat{P}'} = \left((-1)^{\hat{P}}\right)^2 = 1$ 。对于后者则有 $(-1)^{\hat{P}}(-1)^{\hat{P}'} = -1$ 。因此，我们最后得到

$$\begin{aligned} G_{(n_{k_1},n_{k_2},\cdots),(n_{k_1},n_{k_2},\cdots)} &= \frac{N(N-1)}{2N!}(N-2)!2\sum_{(k,s)} n_{k_k} n_{k_s}(g_{ks,ks} - g_{ks,sk}) \\ &= \sum_{(k,s)} n_{k_k} n_{k_s}(g_{ks,ks} - g_{ks,sk}). \end{aligned} \tag{183}$$

这里， $n_{k_k} n_{k_s}$ 的出现，是由于若态 φ_{k_k} 和 φ_{k_s} 不出现在 $\psi_{n_{k_1},n_{k_2}\cdots}$ 中时，则该项的贡献为零。

在粒子数表象中，我们可以如下计算相应的矩阵元 (仅须考虑非零项的贡献)

$$\begin{aligned} &\langle \cdots, n_{k_2}, n_{k_1}|\hat{G}|n_{k_1}, n_{k_2}, \cdots\rangle \\ =\; & \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}\sum_{\alpha'\beta'} g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\langle \cdots, n_{k_2}, n_{k_1}|\hat{C}^\dagger_{\alpha'}\hat{C}^\dagger_{\beta'}\hat{C}_\beta\hat{C}_\alpha|n_{k_1}, n_{k_2}, \cdots\rangle \\ =\; & \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}\sum_{\alpha'\neq\beta'} g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\langle \cdots, n_{k_2}, n_{k_1}|\hat{C}^\dagger_{\alpha'}\hat{C}^\dagger_{\beta'}\hat{C}_\beta\hat{C}_\alpha|n_{k_1}, n_{k_2}, \cdots\rangle\delta_{\beta\beta'}\delta_{\alpha\alpha'} \\ +\; & \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}\sum_{\alpha'\neq\beta'} g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\langle \cdots, n_{k_2}, n_{k_1}|\hat{C}^\dagger_{\alpha'}\hat{C}^\dagger_{\beta'}\hat{C}_\beta\hat{C}_\alpha|n_{k_1}, n_{k_2}, \cdots\rangle\delta_{\beta\alpha'}\delta_{\beta'\alpha} \\ =\; & \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta} g_{\alpha\beta,\alpha\beta}\langle \cdots, n_{k_2}, n_{k_1}|\hat{C}^\dagger_{\alpha}\hat{C}^\dagger_{\beta}\hat{C}_\beta\hat{C}_\alpha|n_{k_1}, n_{k_2}, \cdots\rangle \\ +\; & \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta} g_{\beta\alpha,\alpha\beta}\langle \cdots, n_{k_2}, n_{k_1}|\hat{C}^\dagger_{\beta}\hat{C}^\dagger_{\alpha}\hat{C}_\beta\hat{C}_\alpha|n_{k_1}, n_{k_2}, \cdots\rangle \\ =\; & \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta} g_{\alpha\beta,\alpha\beta}\langle \cdots, n_{k_2}, n_{k_1}|\hat{C}^\dagger_{\alpha}\hat{C}_\alpha\hat{C}^\dagger_{\beta}\hat{C}_\beta|n_{k_1}, n_{k_2}, \cdots\rangle \\ -\; & \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta} g_{\beta\alpha,\alpha\beta}\langle \cdots, n_{k_2}, n_{k_1}|\hat{C}^\dagger_{\beta}\hat{C}_\beta\hat{C}^\dagger_{\alpha}\hat{C}_\alpha|n_{k_1}, n_{k_2}, \cdots\rangle \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}\left(g_{\alpha\beta,\alpha\beta}-g_{\alpha\beta,\beta\alpha}\right)n_\alpha n_\beta \\
&= \sum_{(\alpha,\beta)}\left(g_{\alpha\beta,\alpha\beta}-g_{\alpha\beta,\beta\alpha}\right)n_\alpha n_\beta .
\end{aligned} \tag{184}
$$

计算结果与在波函数表象中得到的完全一致。

(2) 现在，我们再来考虑非对角元。这类矩阵元只有如下的非零项

$$
\begin{aligned}
&\left(\psi_{\cdots 0_i\cdots 0_j\cdots 1_k\cdots 1_l}\cdots,\ \hat{G}\,\psi_{\cdots 1_i\cdots 1_j\cdots 0_k\cdots 0_l\cdots}\right) \\
= &\ \frac{N(N-1)}{2}\left(\psi_{\cdots 0_i\cdots 0_j\cdots 1_k\cdots 1_l}\cdots,\ g(q_1,q_2)\,\psi_{\cdots 1_i\cdots 1_j\cdots 0_k\cdots 0_l\cdots}\right) \\
= &\ \frac{N(N-1)}{2}\frac{1}{N!}\sum_{\hat{P}}\sum_{\hat{P}'}(-1)^{\hat{P}}(-1)^{\hat{P}'}\int dq_1\cdots dq_N \\
\times &\ \hat{P}\left(\varphi^*_{k_1}(q_1)\cdots\boxed{\varphi^*_{k_i}}\cdots\boxed{\varphi^*_{k_j}}\cdots\varphi^*_{k_k}(q_k)\cdots\varphi^*_{k_l}(q_l)\cdots\varphi^*_{k_N}(q_N)\right) \\
\times &\ g(q_1,q_2)\,\hat{P}'\left(\varphi_{k_1}(q_1)\cdots\varphi_{k_i}(q_i)\cdots\varphi_{k_j}(q_j)\cdots\boxed{\varphi_{k_k}}\cdots\boxed{\varphi_{k_l}}\cdots\varphi_{k_N}(q_N)\right).
\end{aligned} \tag{185}
$$

因此，非零项具有形式

$$
\begin{aligned}
&\int dq_1\cdots dq_N\,\varphi^*_{k_1}(q_\alpha)\cdots\boxed{\varphi^*_{k_i}}\cdots\boxed{\varphi^*_{k_j}}\cdots\varphi^*_{k_k}(q_1)\cdots\varphi^*_{k_l}(q_2)\cdots\varphi^*_{k_N}(q_\lambda) \\
\times &\ g(q_1,q_2)\,\varphi_{k_1}(q_\alpha)\cdots\varphi_{k_i}(q_1)\cdots\varphi_{k_j}(q_2)\cdots\boxed{\varphi_{k_k}}\cdots\boxed{\varphi_{k_l}}\cdots\varphi_{k_N}(q_\lambda),
\end{aligned} \tag{186}
$$

或是

$$
\begin{aligned}
&\int dq_1\cdots dq_N\,\varphi^*_{k_1}(q_\alpha)\cdots\boxed{\varphi^*_{k_i}}\cdots\boxed{\varphi^*_{k_j}}\cdots\varphi^*_{k_k}(q_1)\cdots\varphi^*_{k_l}(q_2)\cdots\varphi^*_{k_N}(q_\lambda) \\
\times &\ g(q_1,q_2)\,\varphi_{k_1}(q_\alpha)\cdots\varphi_{k_i}(q_2)\cdots\varphi_{k_j}(q_1)\cdots\boxed{\varphi_{k_k}}\cdots\boxed{\varphi_{k_l}}\cdots\varphi_{k_N}(q_\lambda).
\end{aligned} \tag{187}
$$

两式之间差一个自由度 q_1 与 q_2 的对换，因此差一个符号 (-1) 。我们只需考虑第一项的相因子 $(-1)^{\hat{P}}(-1)^{\hat{P}'}$ 即可。同前面一样，我们可将 $\hat{P}'$ 分解为 $\hat{P}$ 与一些对换的乘积。

首先，在做了置换 $\hat{P}$ 之后，两个乘积

$$
\varphi^*_{k_1}(q_\alpha)\cdots\boxed{\varphi^*_{k_i}}\cdots\boxed{\varphi^*_{k_j}}\cdots\varphi^*_{k_k}(q_1)\cdots\varphi^*_{k_l}(q_2)\cdots\varphi^*_{k_N}(q_\lambda) \tag{188}
$$

与

$$
\varphi_{k_1}(q_\alpha)\cdots\varphi_{k_i}(q_\beta)\cdots\varphi_{k_j}(q_\gamma)\cdots\boxed{\varphi_{k_k}}\cdots\boxed{\varphi_{k_l}}\cdots\varphi_{k_N}(q_\lambda) \tag{189}
$$

有相同的坐标排列 $(q_\alpha, \cdots, q_\beta, \cdots, q_\gamma, \cdots, q_1, \cdots, q_2, \cdots, q_\lambda)$ 。

现在，我们再对第二个乘积内的坐标做对换，使之成为如下的形式

$$q_\alpha, \cdots, q_\beta, \cdots, q_\gamma, \cdots, q_1,\ q_2, \cdots, q_\lambda. \tag{190}$$

即将 q_1 对换成与 q_2 相邻。显然，所需对换的个数为

$$\sum_{\nu=k+1}^{l-1} n_\nu. \tag{191}$$

然后，再将 (q_1, q_2) 一起对换到下面的位置

$$q_\alpha, \cdots, q_1,\ q_2, \cdots, q_\beta, \cdots, q_\gamma \cdots, q_\lambda, \tag{192}$$

使得 q_1 成为波函数 φ_{k_i} 的自由度。在这一过程中，我们得到的符号变化为 $(-1)^L(-1)^L = (-1)^{2L} = 1$ 。最后，我们再将 q_2 向右对换至 φ_{k_j} 的位置，使其成为该波函数的自由度。既我们得到的坐标排列为

$$q_\alpha, \cdots, q_1, \cdots, q_2, \cdots, q_\lambda. \tag{193}$$

在这过程中，所需对换的个数为

$$\sum_{\nu=i+1}^{j-1} n_\nu. \tag{194}$$

它是 φ_{k_i} 与 φ_{k_j} 之间被占据态的个数。因此，我们最后有

$$\begin{aligned} (-1)^{\hat{P}}(-1)^{\hat{P}'} &= (-1)^{\hat{P}}\left((-1)^{\hat{P}}(-1)^{\sum_{\nu=k+1}^{l-1} n_\nu}(-1)^{2L}(-1)^{\sum_{\nu=i+1}^{j-1} n_\nu}\right) \\ &= (-1)^{\sum_{\nu=k+1}^{l-1} n_\nu + \sum_{\nu=i+1}^{j-1} n_\nu}. \end{aligned} \tag{195}$$

故每一个非零项的贡献为

$$2(-1)^{\sum_{\nu=k+1}^{l-1} n_\nu + \sum_{\nu=i+1}^{j-1} n_\nu}\left(g_{kl,ij} - g_{kl,ji}\right). \tag{196}$$

这里，因子 2 的引入是由于我们可以改变 q_1 和 q_2 在乘积

$$\varphi^*_{k_1}(q_\alpha)\cdots\boxed{\varphi^*_{k_i}}\cdots\boxed{\varphi^*_{k_j}}\cdots\varphi^*_k(q_1)\cdots\varphi^*_l(q_2)\cdots\varphi^*_{k_N}(q_\lambda) \tag{197}$$

的位置所致。这样，非对角矩阵元可最后写为

$$
\begin{aligned}
& G_{(\cdots 0_i \cdots 0_j \cdots 1_k \cdots 1_l \cdots)\,(\cdots 1_i \cdots 1_j \cdots 0_k \cdots 0_l \cdots)} \\
= \; & \frac{N(N-1)}{2} \frac{1}{N!} (N-2)! 2 (-1)^{\sum_{\nu=k+1}^{l-1} n_\nu + \sum_{\nu=i+1}^{j-1} n_\nu} \left(g_{kl,ij} - g_{kl,ji} \right) \\
= \; & (-1)^{\sum_{\nu=k+1}^{l-1} n_\nu + \sum_{\nu=i+1}^{j-1} n_\nu} \left(g_{kl,ij} - g_{kl,ji} \right) .
\end{aligned} \tag{198}
$$

再来计算在粒子数表象中的同一矩阵元。我们有

$$
\begin{aligned}
& \langle \cdots 1_l \cdots 1_k \cdots 0_j \cdots 0_i \cdots | \hat{G} | \cdots 1_i \cdots 1_j \cdots 0_k \cdots 0_l \cdots \rangle \\
= \; & \frac{1}{2} \sum_{\alpha'\beta'} \sum_{\alpha\beta} g_{\alpha'\beta',\alpha\beta} \\
\times \; & \left\langle \cdots 1_l \cdots 1_k \cdots 0_j \cdots 0_i \cdots \left| \hat{C}^\dagger_{\alpha'} \hat{C}^\dagger_{\beta'} \hat{C}_\beta \hat{C}_\alpha \right| \cdots 1_i \cdots 1_j \cdots 0_k \cdots 0_l \cdots \right\rangle \\
= \; & \frac{1}{2} \sum_{\alpha' \neq \beta'} \sum_{\alpha \neq \beta} g_{\alpha'\beta',\alpha\beta} \delta_{\alpha j} \delta_{\beta i} \\
\times \; & \left\langle \cdots 1_l \cdots 1_k \cdots 0_j \cdots 0_i \cdots \left| \hat{C}^\dagger_{\alpha'} \hat{C}^\dagger_{\beta'} \underline{\underline{\hat{C}_\beta}} \, \underline{\hat{C}_\alpha} \right| \cdots \underline{\underline{1_i}} \cdots \underline{1_j} \cdots 0_k \cdots 0_l \cdots \right\rangle \\
+ \; & \frac{1}{2} \sum_{\alpha' \neq \beta'} \sum_{\alpha \neq \beta} g_{\alpha'\beta',\alpha\beta} \delta_{\alpha i} \delta_{\beta j} \\
\times \; & \langle \cdots 1_l \cdots 1_k \cdots 0_j \cdots 0_i \cdots | \hat{C}^\dagger_{\alpha'} \hat{C}^\dagger_{\beta'} \overbrace{\hat{C}_\beta \underbrace{\hat{C}_\alpha | \cdots 1_i} \cdots 1_j} \cdots 0_k \cdots 0_l \cdots \rangle \\
= \; & \frac{1}{2} \sum_{\alpha' \neq \beta'} \sum_{\alpha \neq \beta} g_{\alpha'\beta',\alpha\beta} \\
\times \; & \left\langle \cdots 1_l \cdots 1_k \cdots 0_j \cdots 0_i \cdots \left| \hat{C}^\dagger_{\alpha'} \hat{C}^\dagger_{\beta'} \right| \cdots 0_i \cdots 0_j \cdots 0_k \cdots 0_l \cdots \right\rangle \\
\times \; & \left(\delta_{\alpha,j} \delta_{\beta,i} (-1) (-1)^{\sum_{\nu=i+1}^{j-1} n_\nu} + \delta_{\alpha,i} \delta_{\beta,j} (-1)^{\sum_{\nu=i+1}^{j-1} n_\nu} \right) .
\end{aligned} \tag{199}
$$

注意，在上式的最后一行的第一项中有一个额外的因子 (-1) 出现。它是由于在初态中，态 k_i 上有一个粒子导致的。

下面，我们再继续计算矩阵元

$$
\begin{aligned}
& \langle \cdots 1_l \cdots 1_k \cdots 0_j \cdots 0_i \cdots | \hat{C}^\dagger_{\alpha'} \hat{C}^\dagger_{\beta'} | \cdots 0_i \cdots 0_j \cdots 0_k \cdots 0_l \cdots \rangle \\
= \; & \langle \cdots 1_l \cdots 1_k \cdots 0_j \cdots 0_i \cdots | \underbrace{\hat{C}^\dagger_{\alpha'} \overbrace{\hat{C}^\dagger_{\beta'} | \cdots 0_i \cdots 0_j \cdots 0_k} \cdots 0_l} \cdots \rangle \\
+ \; & \langle \cdots 1_l \cdots 1_k \cdots 0_j \cdots 0_i \cdots | \underline{\underline{\hat{C}^\dagger_{\alpha'}}} \, \underline{\hat{C}^\dagger_{\beta'}} | \cdots 0_i \cdots 0_j \cdots \underline{\underline{0_k}} \cdots \underline{0_l} \cdots \rangle \\
= \; & \left(\delta_{\alpha',l} \delta_{\beta',k} (-1) (-1)^{\sum_{\nu=k+1}^{l-1} n_\nu} + \delta_{\alpha',k} \delta_{\beta',l} (-1)^{\sum_{\nu=k+1}^{l-1} n_\nu} \right) .
\end{aligned} \tag{200}
$$

同前面的计算一样，上式最后一行的第一项中的额外因子 (−1) 来源于被占据的单粒子态 φ_{k_k} 。

将方程 (200) 的结果代入公式 (199) 后，我们有

$$\begin{aligned}
&\langle\cdots 1_l\cdots 1_k\cdots 0_j\cdots 0_i\cdots|\hat{G}|\cdots 1_i\cdots 1_j\cdots 0_k\cdots 0_l\cdots\rangle \\
=\ & \frac{1}{2}\sum_{\alpha'\neq\beta'}\sum_{\alpha\neq\beta} g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\left(\delta_{\alpha,i}\delta_{\beta,j}-\delta_{\alpha,j}\delta_{\beta,i}\right)(-1)^{\sum_{\nu=i+1}^{j-1}n_\nu} \\
\times\ & \left(\delta_{\alpha',k}\delta_{\beta',l}-\delta_{\alpha',l}\delta_{\beta',k}\right)(-1)^{\sum_{\nu=k+1}^{l-1}n_\nu} \\
=\ & \frac{1}{2}\left(g_{kl,ij}-g_{kl,ji}-g_{lk,ij}+g_{lk,ji}\right)(-1)^{\sum_{\nu=i+1}^{j-1}n_\nu+\sum_{\nu=k+1}^{l-1}n_\nu} \\
=\ & \left(g_{kl,ij}-g_{kl,ji}\right)(-1)^{\sum_{\nu=i+1}^{j-1}n_\nu+\sum_{\nu=k+1}^{l-1}n_\nu}. \qquad (201)
\end{aligned}$$

这一结果同以前的结果是完全一致的。

下面，我们来看一个具体的例子。

例 1.5：在坐标表象中， N 个全同粒子体系的动能算符可以写作

$$\hat{T}=\sum_{i=1}^{N}\frac{\hat{P}_i^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2. \qquad (202)$$

而在粒子数表象中，它应被写为

$$\hat{T}=\sum_{\alpha,\beta}T_{\alpha\beta}\hat{a}_\alpha^\dagger\hat{a}_\beta. \qquad (203)$$

这里，

$$\begin{aligned}
&T_{\alpha\beta} \\
=\ & \left\langle\varphi_\alpha\left|\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\right|\varphi_\beta\right\rangle \\
=\ & -\frac{\hbar^2}{2m}\int d\mathbf{r}\left(\frac{1}{\sqrt{V}}\exp(i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r})\right)^*\nabla^2\left(\frac{1}{\sqrt{V}}\exp(i\mathbf{k}_\beta\cdot\mathbf{r})\right) \\
=\ & \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{V}\int d\mathbf{r}\,k_\beta^2\,\exp\left[i\left(\mathbf{k}_\beta-\mathbf{k}_\alpha\right)\cdot\mathbf{r}\right]=\frac{\hbar^2k_\beta^2}{2m}\frac{1}{V}\int d\mathbf{r}\exp\left[i\left(\mathbf{k}_\beta-\mathbf{k}_\alpha\right)\cdot\mathbf{r}\right] \\
=\ & \frac{\hbar^2k_\beta^2}{2m}\delta_{\alpha\beta}. \qquad (204)
\end{aligned}$$

代入算符 $\hat{T}$ 的表达式后，我们得到

$$\hat{T} = \sum_{\alpha\beta} \frac{\hbar^2 k_\beta^2}{2m} \delta_{\alpha\beta} \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta = \sum_\alpha \frac{\hbar^2 k_\alpha^2}{2m} \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha. \tag{205}$$

\$ 1.5 **粒子数表象和二次量子化的关系**

最后，我们可以讲一下粒子数表象与二次量子化这一名词之间的关系。以周期边条件下的单粒子体系为例。它的 Schrödinger 方程为

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r},\, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r},\, t). \tag{206}$$

其一般解可以写作

$$\psi(\mathbf{r},\, t) = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_{\mathbf{k}} t\right). \tag{207}$$

这里， $a_{\mathbf{k}}$ 是展开系数。将它代入单粒子动能的表达式，我们得到

$$\begin{aligned}
T &= \int d\mathbf{r}\, \psi^*(\mathbf{r},\, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right) \psi(\mathbf{r},\, t) \\
&= \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2} \left(\int d\mathbf{r}\, \varphi_{\mathbf{k}_1}^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right) \varphi_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}) \right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}(E_{\mathbf{k}_1} - E_{\mathbf{k}_2}) t\right) \\
&= \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2} \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \exp\left(\frac{i}{\hbar}(E_{\mathbf{k}_1} - E_{\mathbf{k}_2}) t\right) \\
&= \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.
\end{aligned} \tag{208}$$

我们看到，若我们将 $a_{\mathbf{k}}$ 改写成 $\hat{a}_{\mathbf{k}}$， $a_{\mathbf{k}}^*$ 改写成 $\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger$，则我们得到了多粒子体系中动能算符在粒子数表象中的表达式。因此，一种很自然的倾向是将

$$\hat{\psi}(\mathbf{r},\, t) = \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-iE_{\mathbf{k}} t/\hbar} \tag{209}$$

解释成场算符，而将 $|\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2$ 解释成在空间 $\mathbf{r}$ 处消灭一个 $\mathbf{k}$ 态上的粒子的几率密度。这一重新解释 Schrödinger 方程的解的物理意义的过程称为二次量子化。

既然 $\hat{\psi}(\mathbf{r}, t)$ 被视作算符，我们就需要确定它们的对易关系。对于同一时刻的两个算符，我们有

$$\begin{aligned}\left[\hat{\psi}(\mathbf{r},\,t),\,\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}',\,t)\right] &= \sum_{\mathbf{k}_1}\sum_{\mathbf{k}_2}\left[\hat{a}_{\mathbf{k}_1},\,\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}_2}\right]\varphi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r})\varphi^*_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}')\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(E_{\mathbf{k}_1}-E_{\mathbf{k}_2}\right)t\right)\\ &= \sum_{\mathbf{k}_1}\sum_{\mathbf{k}_2}\delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}\varphi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r})\varphi^*_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}')\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(E_{\mathbf{k}_1}-E_{\mathbf{k}_2}\right)t\right)\\ &= \sum_{\mathbf{k}_1}\varphi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r})\varphi^*_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}').\end{aligned} \tag{210}$$

同理，我们可证

$$\left[\hat{\psi}(\mathbf{r},\,t),\,\hat{\psi}(\mathbf{r}',\,t)\right]=0,\quad \left[\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r},\,t),\,\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}',\,t)\right]=0. \tag{211}$$

对于费米子，我们则有

$$\left\{\hat{\psi}(\mathbf{r},\,t),\,\hat{\psi}(\mathbf{r}',\,t)\right\}=0,\quad \left\{\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r},\,t),\,\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}',\,t)\right\}=0, \tag{212}$$

和

$$\left\{\hat{\psi}(\mathbf{r},\,t),\,\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}',\,t)\right\}=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{213}$$

在多体理论中，人们常常要讨论如下的 Green 函数

$$G(\mathbf{r},t_1;\,\mathbf{r}',t_2)=-i\theta(t_1-t_2)\left\langle\phi_0\left|\psi(\mathbf{r},\,t_1)\psi^{\dagger}(\mathbf{r}',\,t_2)\right|\phi_0\right\rangle. \tag{214}$$

它的物理意义是，在时刻 t_2 时，在 $\mathbf{r}'$ 处产生一个粒子。然后在传播了一段时间后，再在时刻 t_1 时，在 $\mathbf{r}$ 处发现它的几率。借此，人们可以反推出有关体系基态 $|\phi_0\rangle$ 的信息。

练习：在经典电动力学中，一个粒子的自能相互作用可以写作

$$\begin{aligned}U &= \frac{1}{2}\int\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2\,\rho(\mathbf{r}_1)V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\rho(\mathbf{r}_2)\\ &= \frac{1}{2}\int\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2\,\psi^*(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_1)V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\psi^*(\mathbf{r}_2)\psi(\mathbf{r}_2)\\ &= \frac{1}{2}\int\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2\,\psi^*(\mathbf{r}_1)\psi^*(\mathbf{r}_2)V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\psi(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_2).\end{aligned} \tag{215}$$

利用二次量子化及算符 $\hat{\psi}$ 和 $\hat{\psi}^{\dagger}$ 的对易关系，证明上式给出二体算符在粒子数表象中的形式。

作业：教科书 185-187 页上习题 4.1， 4.2， 4.8 。