重生之每天坚持学不会从入学到入土
组内自用手搓讲义

阿毛

2024 年 4 月 9 日

第 1 章　二次量子化

二次量子化的形式可以从高量角度理解，也可以直接从场论出发，由于未学习场论，本章采用高量的语言。

1.1　速通本章

波函数语言在描述量子体系的时候是自洽的，但是在多体系统中，通常会出现 $\sum_N \int \Psi_N^\dagger(r)\Psi_N(r)d(\vec{r})$ 的情况，共有 $N! \times N!$ 项，计算量巨大。相较之下，粒子数表示的表达非常简洁，且也能在多体系统中描述体系的变化（粒子的产生与湮灭）。无论是费米子系统还是玻色子系统，都可以从波函数表示转化为粒子数表示，这就是所谓的二次 (历史上时间的第二次) 量子化。

单体力学量算符 $\hat{F}$（例如动量）在粒子数表象下可表示为：

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

其中

$$f_{\alpha\beta} = \langle\psi_\alpha|\hat{f}|\psi_\beta\rangle = \int dq\psi_\alpha^*(q)\hat{f}(q)\psi_\beta(q),$$

而两体力学量算符

$$\hat{G} = \sum_{a<b}\hat{g}(a,b) \tag{1.1}$$

例如:

$$V(q_1,q_2,q_N) = \sum_{i<j}\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} = \frac{1}{2}\sum_{i,j}\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \tag{1.2}$$

在粒子数表象中可以写为如下形式:

$$\hat{G} = \frac{1}{2}\sum_{\alpha'\beta'}\sum_{\alpha\beta} g_{\alpha'\beta',\alpha\beta}\hat{a}_{\alpha'}^\dagger\hat{\alpha}_{\beta'}^\dagger\hat{a}_\beta\hat{a}_\alpha \tag{1.3}$$

其中

$$g_{\alpha'\beta',\alpha\beta} = \int dq_1 dq_2 \varphi_{\alpha'}^*(q_1)\varphi_(^*q_2)\hat{g}(q_1,q_2)\varphi_\alpha(q_1)\varphi_\beta(q_2). \tag{1.4}$$

波函数 Ψ 则可以表示为粒子数的态 $|n\rangle$，其中 n 是某个态的粒子数。关于产生湮灭算符的作用，后面会提到，需要注意力学量作用在态上时，需要遵循火车到站的规则（老田的课里有），即算符作用后，存在一个置换的关系。

1.2 数学准备

首先明确本讲义目标：快速上手理解课题组工作中涉及的概念，如需要完整学习，详情参考 B 站田光善老师高等量子力学课程。网页链接

1.2.1 置换群

群论在物理学中的应用很广泛，但此处并不深入讨论，只需要把群操作视为一种算符，以方便理解。如群的定义，群的性质等，此处不说明。

置换定义如下:

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \dots & N \\ P(1) & P(2) & P(3) & \dots & P(N) \end{pmatrix} \tag{1.5}$$

举例

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 1 & 2 & 5 & 3 \end{pmatrix} \tag{1.6}$$

可以表示为 $P(1) = 4, P(2) = 1$。

对换 (特殊的置换):