§35 占有数表象

§35-1 态函数

$$|n_1 n_2 \cdots n_l \cdots\rangle = \sqrt{\frac{\left(\sum n_i\right)!}{n_1!n_2!\cdots n_l!\cdots}}\,|b_1 b_2 \cdots b_\nu\rangle$$

是单粒子***B***表象的***n***粒子对称化**Hilbert**空间中的一组基矢，它所描写的是***n***粒子系统中有$\boldsymbol{n_l}$个粒子处于单粒子$\boldsymbol{b_l}$态(***l***=**1,2,3…**)的状态。

对于n粒子系统的一般的状态$|\psi>$，可以写成按这套基矢展开的形式：

$$|\psi\rangle=\sum_{n_1}\sum_{n_2}\cdots\sum_{n_l}\cdots\delta(n-\sum n_i)\,|n_1n_2\cdots n_l\cdots\rangle\langle n_1n_2\cdots n_l\cdots|\psi\rangle$$
$$=\sum_{n_1}\sum_{n_2}\cdots\sum_{n_l}\cdots\delta(n-\sum n_i)\,|n_1n_2\cdots n_l\cdots\rangle\psi(n_1n_2\cdots n_l\cdots)$$

式中 $$\psi(n_1n_2\cdots n_l\cdots)=\langle n_1n_2\cdots n_l\cdots|\psi\rangle$$

是展开系数。根据表象理论，$\psi(n_1n_2\ldots n_l\ldots)$称为状态$|\psi>$在占有数表象中的态函数；因为基矢$\{|n_1n_2\ldots n_l\ldots>\}$是占有数算符$N_i$的共同本征矢量，所以称此为占有数表象。

态函数$\psi(n_1 n_2 \ldots n_l \ldots)$的意义：$|\psi(n_1 n_2 \ldots n_l \ldots)|^2$是指在$n$粒子系统中，有$n_1$个粒子在$b_1$态，$n_2$个粒子在$b_2$态，…,$n_l$个粒子在$b_l$态的概率。$n_1 n_2 \ldots$满足

$$\sum_i n_i = n$$

若ψ描写Bose子，n_i可取0和正整数，不可以取负数；若ψ描写Fermi子，则n_i只能取0和1两值。

§35-2 产生算符和消灭算符

一、产生算符和消灭算符对态函数的作用

产生算符矩阵元为

$$\langle n_1'n_2'\cdots n_l'\cdots|a_l^+|n_1n_2\cdots n_l\cdots\rangle=\langle n_1'n_2'\cdots n_l'\cdots|\varepsilon_l\sqrt{n_l+1}\,|n_1n_2\cdots n_l+1\cdots\rangle$$
$$=\varepsilon_l\sqrt{n_l+1}\,\delta_{n_1'n_1}\delta_{n_2'n_2}\cdots\delta_{n_l'n_l+1}\cdots$$

消灭算符矩阵元为

$$\langle n_1'n_2'\cdots n_l'\cdots|a_l|n_1n_2\cdots n_l\cdots\rangle=\varepsilon_l\sqrt{n_l}\,\delta_{n_1'n_1}\delta_{n_2'n_2}\cdots\delta_{n_l'n_l-1}\cdots$$

设 $|\phi\rangle = G|\psi\rangle$ 取占有数表象，

$$\langle n_1 n_2 \cdots n_l \cdots|\phi\rangle$$
$$= \sum_{n_1'}\sum_{n_2'}\cdots\sum_{n_l'}\cdots\langle n_1 n_2 \cdots n_l \cdots|G|n_1' n_2' \cdots n_l' \cdots\rangle\langle n_1' n_2' \cdots n_l' \cdots|\psi\rangle$$

取 $G = a_l^+$ 得

$$\phi(n_1 n_2 \cdots n_l \cdots) = \sum_{n_1'}\sum_{n_2'}\cdots\sum_{n_l'}\cdots\varepsilon_l'\sqrt{n_l'+1}\,\delta_{n_1 n_1'}\delta_{n_2 n_2'}\cdots\delta_{n_l n_l'+1}\cdots\psi(n_1' n_2' \cdots n_l' \cdots)$$
$$= \varepsilon_l\sqrt{n_l}\,\psi(n_1 n_2 \cdots n_l - 1 \cdots)$$

由于**δ**函数的存在，消去了矩阵相乘时的取和操作，

所以 $\phi(n_1 n_2 \cdots n_l \cdots) = \hat{a}^+\psi(n_1 n_2 \cdots n_l \cdots)$

$\hat{a}^+$的定义为

$$\hat{a}_l^+\psi(n_1 n_2 \cdots n_l \cdots) = \varepsilon_l\sqrt{n_l}\,\psi(n_1 n_2 \cdots n_l - 1 \cdots)$$

若取（**35.6**）式中的***G***为消灭算符$\boldsymbol{a_l}$，则可得到

$$\hat{a}_l\psi(n_1 n_2 \cdots n_l \cdots) = \varepsilon_l \sqrt{n_l + 1}\psi(n_1 n_2 \cdots n_l + 1 \cdots)$$

二、算符的对易关系

取具体表象并不改变矢量空间中矢量与算符的关系。

$$\hat{a}_l^+ \hat{a}_{l'}^+ - \varepsilon \hat{a}_{l'}^+ \hat{a}_l^+ = 0$$

$$\hat{a}_l \hat{a}_{l'} - \varepsilon \hat{a}_{l'} \hat{a}_l = 0$$

$$\hat{a}_l \hat{a}_{l'}^+ - \varepsilon \hat{a}_{l'}^+ \hat{a}_l = \delta_{ll'}$$

占有数算符与总粒子数算符

$$\hat{N}_l = \hat{a}_l^+ \hat{a}_l, \quad \hat{N} = \sum \hat{N}_l$$

$$\left[\hat{N}_l, \hat{a}_m^+\right] = \hat{a}_m^+ \delta_{lm}$$

$$\left[\hat{N}_l, \hat{a}_m\right] = -\hat{a}_m \delta_{lm}$$

三、产生算符对态函数作用的理解

由**(35.8)**式知，产生算符作用于态函数，使其自变量减少**1**（以及乘上一个因子）而不是增加**1**。

例如有一个态$|n_1n_2n_3\rangle=|214\rangle$，这是一个7粒子态，其中有两个在$b_1$态，一个在$b_2$态，四个在$b_3$态。这个态是占有数表象的一个基矢，其态函数形式为

$$\psi(n_1n_2n_3)=\delta_{n_1 2}\delta_{n_2 1}\delta_{n_3 4}$$

因为n_1取2，n_2取1和n_3取4同时成立时概率为1，取其它值的概率为零。这是对态函数的定义，按照这种定义，三个“变量”分别取2，1，4时才为非零值。

使用产生算符作用

$$\hat{a}_3^+\psi(n_1 n_2 n_3) = \varepsilon^{n_1+n_2}\sqrt{n_3}\,\psi(n_1, n_2, n_3 - 1) = \varepsilon^{n_1+n_2}\sqrt{n_3}\,\delta_{n_1 2}\delta_{n_2 1}\delta_{(n_3-1)4}$$
$$= \varepsilon^3\sqrt{5}\,\delta_{n_1 2}\delta_{n_2 1}\delta_{n_3 5}$$

产生算符的作用，正好是在第三态上增加一个粒子。但是，产生算符对态函数的作用使其中相应的自变量减少1，而不是使自变量增加1。

§35-3 算符两种形式的比较

两种形式的算符：一种是作用于态矢量的，定义是：

$$a_l^+ \mid n_1 n_2 \cdots n_l \cdots\rangle = \varepsilon_l \sqrt{n_l + 1} \mid n_1 n_2 \cdots n_l + 1 \cdots\rangle$$

$$a_l \mid n_1 n_2 \cdots n_l \cdots\rangle = \varepsilon_l \sqrt{n_l} \mid n_1 n_2 \cdots n_l - 1 \cdots\rangle$$

另一种是占有数表象中作用于态函数上的，其定义是：

$$a_l^+ \psi(n_1 n_2 \cdots n_l \cdots) = \varepsilon_l \sqrt{n_l} \psi(n_1 n_2 \cdots n_l - 1 \cdots)$$

$$a_l \psi(n_1 n_2 \cdots n_l \cdots) = \varepsilon_l \sqrt{n_l + 1} \psi(n_1 n_2 \cdots n_l + 1 \cdots)$$

二者的区别：

（1）$|n_1n_2\ldots n_l\ldots>$是基矢，其中的$n_1n_2\ldots n_l\ldots$是具体的数；而$\psi(n_1n_2\ldots n_l\ldots)$是占有数表象中的态函数，可以描写任意状态，其中的$n_1n_2\ldots n_l\ldots$是函数的自变量，不是固定的数。

（2）a_l^+作用于$|n_1n_2\ldots n_l\ldots>$时,(35.12)式等号右边的根号中写什么，要看被作用的基矢中第l个n是什么数，写这个数加1；对于作用于函数上的产生算符，(35.14)式等号右边根号中永远是自变量n_l，不必管被作用的函数；

（3）关于符号因子

$$\varepsilon_l = \varepsilon^{n_1+n_2+\cdots+n_{l-1}}$$

对于作用于基矢的产生算符，符号因子指数上的$\boldsymbol{n_1+n_2+\ldots+n_{l-1}}$要根据被作用的基矢来写。但对于作用于态函数的产生算符，指数就是$\boldsymbol{n_1+n_2+\ldots+n_{l-1}}$，不管受作用的态函数的情况。

（**4**）对于作用于态矢量的产生算符，**(35.12)**式等号右边矢量前面的因子是常数 $\varepsilon_l\sqrt{n_l+1}$ ，如再有另外的算符来作用，可以提到算符之前。但对于作用于态函数上的产生算符来说，**(35.14)**式等号右边的因子 $\varepsilon_l\sqrt{n_l}$ 仍含有自变量，若遇到其他的算符来作用，应当把 $\varepsilon_l\sqrt{n_l}\psi$ 整个当作一个函数来接受新算符的作用。

比如

$$
\begin{aligned}
&\hat{a}_l\hat{a}_{l'}^{+}\Phi(\cdots n_l,\cdots n_{l'},\cdots) \qquad (l<l') \\
&=\hat{a}_l\varepsilon^{n_1+n_2+\cdots+n_l+\cdots n_{l'-1}}\sqrt{n_{l'}}\Phi(\cdots n_l,\cdots(n_{l'}-1),\cdots) \\
&=\varepsilon^{n_1+n_2+\cdots+n_{l-1}}\sqrt{n_l+1}\varepsilon^{n_1+n_2+\cdots+(n_l+1)+\cdots n_{l'-1}}\sqrt{n_{l'}}\Phi(\cdots n_l+1,\cdots n_{l'}-1,\cdots)
\end{aligned}
$$

（5）当n_i<0时态函数$\psi(n_1 n_2 \ldots n_l \ldots)$自动为零；对Fermi子还要加上$n_i$>1时自动为零。

对Fermi子系统进行以下计算：

$$
\begin{aligned}
&(\hat{a}_l \hat{a}_l^+ + \hat{a}_l^+ \hat{a}_l)\psi(\cdots n_l \cdots) \\
&= \hat{a}_l \varepsilon_l \sqrt{n_l}\psi(\cdots n_l - 1 \cdots) + \hat{a}_l^+ \varepsilon_l \sqrt{n_l + 1}\psi(\cdots n_l + 1 \cdots) \\
&= \varepsilon_l \sqrt{n_l + 1}\varepsilon_l \sqrt{n_l + 1}\psi(\cdots n_l \cdots) + \varepsilon_l \sqrt{n_l}\varepsilon_l \sqrt{(n_l + 1) - 1}\psi(\cdots n_l \cdots) \\
&= (n_l + 1)\psi(\cdots n_l \cdots) + n_l \psi(\cdots n_l \cdots) \\
&= (2n_l + 1)\psi(\cdots n_l \cdots)
\end{aligned}
$$

这个结果是错误的。

为了避免这种错误，可以把**Fermi**子的产生算符和消灭算符的定义式**(35.14)**和**(35.15)**式改写为

$$a_l^+\psi(n_1n_2\cdots n_l\cdots)=\delta_{n_l,1}\varepsilon_l\sqrt{n_l}\psi(n_1n_2\cdots n_l-1\cdots)$$

$$a_l\psi(n_1n_2\cdots n_l\cdots)=\delta_{n_l,0}\varepsilon_l\sqrt{n_l+1}\psi(n_1n_2\cdots n_l+1\cdots)$$

此时

$$\begin{aligned}
&(a_la_l^++a_l^+a_l)\psi(\cdots n_l\cdots)\\
&=a_l\delta_{n_l,1}\varepsilon_l\sqrt{n_l}\psi(\cdots n_l-1\cdots)+a_l^+\delta_{n_l,0}\varepsilon_l\sqrt{n_l+1}\psi(\cdots n_l+1\cdots)\\
&=\delta_{n_l,0}\varepsilon_l\sqrt{n_l+1}\delta_{n_l+1,1}\varepsilon_l\sqrt{n_l+1}\psi(\cdots n_l+1-1\cdots)+\\
&\quad+\delta_{n_l,1}\varepsilon_l\sqrt{n_l}\delta_{n_l-1,0}\varepsilon_l\sqrt{n_l-1+1}\psi(\cdots n_l-1+1\cdots)\\
&=\delta_{n_l,0}(n_l+1)\psi(\cdots n_l\cdots)+\delta_{n_l,1}n_l\psi(\cdots n_l\cdots)\\
&=\psi(\cdots n_l\cdots)
\end{aligned}$$

即

$$\hat{a}_l\hat{a}_l^++\hat{a}_l^+\hat{a}=1$$