§32　离散本征值情况

B若具有离散谱，理论还可简化。有时有些物理量本来是连续的，也设法把它的本征谱变成离散的。例如可以用箱归一化，使动量的本征值成为离散的，从而建立离散的动量占有数表象。

§32-1基矢

B表象的对称化基矢

$$\left|b_r b_s \cdots b_\nu\right\rangle = \frac{1}{n!}\sum_P \varepsilon^p P\left|b_r\right\rangle_1 \left|b_s\right\rangle_2 \cdots \left|b_\nu\right\rangle_n$$

基矢的正交归一化关系式

$$\langle b_{r'}b_{s'}\cdots b_{\nu'}|b_r b_s\cdots b_\nu\rangle=\frac{1}{n!}\sum_P \varepsilon^p P\delta_{r'r}\delta_{s's}\cdots\delta_{\nu'\nu}$$

一、离散B表象中对称化基矢与占有数表象基矢的关系

针对离散本征值的特点作两点改变：

a. 改变基矢的名称，也就是改变表示基矢的记号的写法；

b. 改变基矢的归一化，因为这时有可能把一切**Fock**空间中的基矢都归一化为**1**。

设b_1出现的次数为n_1，b_2为n_2，…b_l为n_l，那么也可以用一组数字$n_1,n_2,\ldots n_l\ldots$来表示。把基矢写成

$$\left|n_1 n_2 \cdots n_l \cdots\right\rangle = c\left|b_r b_s \cdots b_v\right\rangle$$

c是一个待定的常数，n_1,n_2等是在状态$|n_1n_2\ldots n_l\ldots\rangle$中处于第一、第二本征态中粒子的数目。单粒子算符$B$有多少个本征态，右矢中就有多少个$n$，有的可以等于0。

系统中的粒子总数

$$n = \sum_l n_l$$

$\boldsymbol{n_l}$是正整数或零。对于**Fermi**子，只能取**0**和**1**两个值。规定对于**Bose**子和**Fermi**子，若有一个$\boldsymbol{n_l}$**<0**或对于**Fermi**子有一个$\boldsymbol{n_l}$**>1**，则整个基矢即等于零。$\boldsymbol{n_1, n_2, \ldots n_l, \ldots}$取满足总和为$\boldsymbol{n}$的一切可能的组合，构成了$\boldsymbol{n}$粒子**Hilbert**空间$\boldsymbol{R}_{\mathbf{n}}$的全部基矢。

若去掉 $\sum_l n_l = n$ 这一条件，取$\boldsymbol{n_1, n_2, \ldots n_l, \ldots}$的一切可能取值的组合，$|\boldsymbol{n_1 n_2 \ldots n_l \ldots}\rangle$就构成了巨**Hilbert**空间$\boldsymbol{R_G}$的全部基矢。通常把以$|\boldsymbol{n_1 n_2 \ldots n_l \ldots}\rangle$为基矢的多粒子表象称为占有数表象，$\boldsymbol{n_l}$称为在单粒子算符的第$\boldsymbol{l}$个本征态中粒子的占有数。

二、正交归一和完全性关系

1. 标准顺序：

对于Fermi子来说，$|b_r b_s \ldots b_v>$和$|b_s b_r \ldots b_v>$要相差一个负号，但它们二者都相当于相同的一组$n_1, n_2, \ldots n_l, \ldots$，那么就发生一个$|n_1 n_2 \ldots n_l \ldots>$取什么符号的问题。在此，我们取$c>0$，并且约定（32.3）式只对$b_r b_s \ldots b_v$某一标准顺序排列好之后的右矢$|b_r b_s \ldots b_v>$成立，这个右矢约定为正。例如标准顺序可以取$b_r \leq b_s \leq \ldots \leq b_v$（或相反的顺序），这样，相同的$b$（对Bose子）都是排在一起的。

2. 归一化：

$$1 = \langle n_1 n_2 \cdots n_l \cdots | n_1 n_2 \cdots n_l \cdots \rangle = c^2 \langle b_r b_s \cdots b_\nu | b_r b_s \cdots b_\nu \rangle$$

此式右边的内积根据（**32.2**）式为

$$\frac{1}{n!} \sum_P \varepsilon^p P \delta_{rr} \delta_{ss} \cdots \delta_{\nu\nu}$$

式中的算符P表示：令那些δ算符的第一个下标不动，排列其第二个下标。既然这个态中有n_1个b等于b_1，那么在这个n_1个相同的b_1作排列时，可产生$n_1!$项不为零的项，每一项都等于1。同样，在n_2个相同的b_2之间排列，又产生$n_2!$项等于1的项，因此上式为

$$\frac{1}{n!}\sum_{P}\varepsilon^{p}P\delta_{rr}\delta_{ss}\cdots\delta_{\nu\nu}=\frac{1}{n!}n_1!n_2!\cdots n_l!\cdots$$

代入上面的归一化关系式，得 $c=\sqrt{\dfrac{n!}{n_1!n_2!\cdots n_l!\cdots}}$

所以 $\left|n_1 n_2\cdots n_l\cdots\right\rangle=\sqrt{\dfrac{n!}{n_1!n_2!\cdots n_l!\cdots}}\left|b_r b_s\cdots b_\nu\right\rangle$

式中等号右边的右矢中$\boldsymbol{b_r b_s \ldots b_\nu}$是按照标准顺序排列的。按这种方式定义的$\boldsymbol{|n_1 n_2 \ldots n_l \ldots>}$满足正交归一化关系 $\left\langle n_1' n_2'\cdots n_l'\cdots\middle|n_1 n_2\cdots n_l\cdots\right\rangle=\delta_{n_1'n_1}\delta_{n_2'n_2}\cdots\delta_{n_l'n_l}\cdots$

对于Fermi子，

$$\left|n_1 n_2\cdots n_l\cdots\right\rangle=\sqrt{n!}\left|b_r b_s\cdots b_\nu\right\rangle$$

3. 完全性关系：

对于总粒子数不变的系统，完全性关系是

$$\sum_{n_1}\sum_{n_2}\cdots\sum_{n_l}\cdots\delta(n-\sum_i n_i)\left|n_1 n_2\cdots n_l\cdots\right\rangle\left\langle n_1 n_2\cdots n_l\cdots\right|=1$$

巨**Hilbert**空间的完全性关系为

$$\sum_{n_1}\sum_{n_2}\cdots\sum_{n_l}\cdots\left|n_1 n_2\cdots n_l\cdots\right\rangle\left\langle n_1 n_2\cdots n_l\cdots\right|=1$$

巨**Hilbert**空间中的任何矢量可以展开为这些基矢的叠加

$$\left|\psi\right\rangle\rangle=\sum_{n_1}\sum_{n_2}\cdots\sum_{n_l}\cdots\left|n_1 n_2\cdots n_l\cdots\right\rangle\left\langle n_1 n_2\cdots n_l\cdots\right|\psi\rangle\rangle$$

§32-2 产生算符和消灭算符

一、产生算符 $a^+(b_l)$

$$a_l^+|b_r b_s \cdots b_\nu\rangle = \sqrt{n+1}|b_l b_r b_s \cdots b_\nu\rangle$$

式中右矢中的$\boldsymbol{b_r b_s \ldots b_\nu}$应按标准顺序排列。

$$a_l^+|n_1 n_2 \cdots n_l\rangle = \sqrt{\frac{n!}{n_1!n_2!\cdots n_l!\cdots}}a_l^+|b_r b_s \cdots b_\nu\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{n!}{n_1!n_2!\cdots n_l!\cdots}}\sqrt{n+1}|b_l b_r b_s \cdots b_\nu\rangle$$

为了把上式最右边的右矢变回成$|n_1 n_2 \ldots n_l \ldots>$的形式，必须首先把其中的$b_l b_r b_s \ldots b_\nu$变回成标准顺序。如果$b_l$不是最小的，就应当向右移，在移到自己应在位置之前，一定要同n_1个b_1的对调，同n_2个b_2对调，……一直到同n_l-1个b_l-1对调（当某些b_m不出现时，即这个态没被占居时，$n_m=0$），因而产生一个符号因子

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

即

$$\begin{aligned}|b_l b_r b_s \cdots b_\nu\rangle &= \varepsilon_l |b_r b_s \cdots b_l \cdots b_\nu\rangle \\ &= \varepsilon_l \sqrt{\frac{n_1! n_2! \cdots (n_l+1)!}{(n+1)!}} |n_1 n_2 \cdots n_l + 1 \cdots\rangle\end{aligned}$$

将其代回上式得

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

二、消灭算符 a_l

$$a_l|b_r b_s \cdots b_\nu\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}[\delta_{l\,r}|b_s b_t \cdots b_\nu\rangle + \varepsilon\delta_{ls}|b_r b_t \cdots b_\nu\rangle$$

$$+\cdots+\varepsilon^{n-1}\delta_{l\nu}|b_r b_s \cdots b_u\rangle]$$

若等号左边右矢中***b***处于标准顺序，则右边各个右矢也是如此。

$$a_l\left|n_1 n_2 \cdots n_l \cdots\right\rangle = \sqrt{\frac{n!}{n_1! n_2! \cdots n_l! \cdots}}\, a_l \left|b_r b_s \cdots \overbrace{b_l b_l \cdots b_l}^{n_l\text{个}} \cdots b_\nu\right\rangle$$

此式等号右边的右矢是按照标准顺序排列的，其中有$\boldsymbol{n_l}$个$\boldsymbol{b_l}$，而第一个$\boldsymbol{b_l}$前面有$\boldsymbol{n_1+n_2+\ldots+n_{l-1}}$个小于$\boldsymbol{b_l}$的$\boldsymbol{b}$，故$\boldsymbol{l\neq r,s,\ldots}$。。于是在（**32.12**）中，等号右边括号中前面很多项都是零，不为零的应该从第$\boldsymbol{(n_1+n_2+\ldots+n_{l-1})+1}$项（注意不是从$\boldsymbol{n_l}$项）开始，这一项前面的符号因子应该是

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

不为零的项一共有n_l项，它们都是一样的，符号因子也一样，因为Fermi子只有一项，而Bose子ε=1。因此由（32.12）式有

$$a_l|b_r b_s\cdots b_l b_l\cdots b_l\cdots b_\nu\rangle=\frac{n_l}{\sqrt{n}}\varepsilon_l\,|b_r b_s\cdots\overbrace{b_l\cdots b_l}^{n_l-1\text{个}}\cdots b_\nu\rangle$$

左边右矢中有n_l个b_l，而右边右矢中有n_l-1个b_l。于是最后a_l的对|$n_1n_2\ldots n_l$>的作用是

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

三、对易关系

$$a_l^+ a_{l'}^+ - \varepsilon a_{l'}^+ a_l^+ = 0$$

$$a_l a_{l'} - \varepsilon a_{l'} a_l = 0$$

$$a_l a_{l'}^+ - \varepsilon a_{l'}^+ a_l = \delta_{ll'}$$

§ 32-3 占有数算符

一、占有数算符

$$N_l = a_l^+ a_l$$

N_l称为处于b_l态的粒子数算符或占有数算符

将N_l作用于基矢$|n_1 n_2 \ldots n_l \ldots>$上，得

$$\begin{aligned} N_l \left| n_1 n_2 \cdots n_l \cdots \right\rangle &= a_l^+ a_l \left| n_1 n_2 \cdots n_l \cdots \right\rangle \\ &= a_l^+ \varepsilon_l \sqrt{n_l} \left| n_1 n_2 \cdots n_l - 1 \cdots \right\rangle \\ &= \varepsilon_l \sqrt{n_l} \varepsilon_l \sqrt{(n_l - 1) + 1} \left| n_1 n_2 \cdots n_l \cdots \right\rangle \\ &= n_l \left| n_1 n_2 \cdots n_l \cdots \right\rangle \end{aligned}$$

对于一个全同粒子系统，当单粒子算符B指定之后，就可以建立B的占有数表象。对于B的每一本征态$|b_l>$，有一个占有数算符 $N_l = a_l^+ a_l$

全部占有数算符的共同本征矢量就是系统的占有数表象的基矢。这就是把以$|n_1 n_2 \ldots n_l \ldots>$为基矢的表象称为占有数表象的原因。

二、总粒子数算符

$$N = \sum N_l$$

它对于基矢的作用是 $N|n_1 n_2 \cdots n_l \cdots\rangle = (\sum_i n_i)|n_1 n_2 \cdots n_l \cdots\rangle$

总粒子数算符那些本征值为***n***的本征矢量全体构成了对称化的***n***粒子**Hilbert**空间$\boldsymbol{R_n}$。

三、对易关系

$$[N_l, a_m^+] = a_m^+ \delta_{lm}$$

$$[N_l, a_m] = -a_m \delta_{lm}$$

§32-4 算符的二次量子化形式

在离散本征值的情况下，全同粒子系统的一般算符G的二次量子化的形式成为

$$
\begin{aligned}
G &= G^{(1)} + G^{(2)} + \cdots \\
&= \sum_{b_{l'}} \sum_{b_l} a_{l'}^{+} \langle b_{l'} | g^{(1)} | b_l \rangle a_l + \frac{1}{2!} \sum_{b_{l'}} \sum_{b_{m'}} \sum_{b_l} \sum_{b_m} a_{l'}^{+} a_{m'}^{+} (b_{l'} b_{m'} | g^{(2)} | b_l b_m) a_m a_l + \cdots
\end{aligned}
$$

例题：计算全同粒子系统的总轨道角动量的二次量子化形式。总轨道角动量平方算符是

$$
\begin{aligned}
L^2 = \vec{L}\cdot\vec{L} &= [\sum_i \sum_{n=1}^{3} L_{in}\vec{e}_n]\cdot[\sum_j \sum_{m=1}^{3} L_{jm}\vec{e}_m] \\
&= \sum_i [L_{ix}^2 + L_{iy}^2 + L_{iz}^2] + \sum_{i\neq j}[L_{ix}L_{jx} + L_{iy}L_{jy} + L_{iz}L_{jz}] \\
&= \sum_i [L_{ix}^2 + L_{iy}^2 + L_{iz}^2] + \sum_{i\neq j}[L_{iz}L_{jz} + L_{i+}L_{j-} + iL_{ix}L_{jy} - iL_{iy}L_{jx}] \\
&= \sum_i L_i^2 + \sum_{i\neq j}[L_{iz}L_{jz} + L_{i+}L_{j-}] \\
&= \sum_i g_i^{(1)} + \sum_{i\neq j} g_{ij}^{(2)}
\end{aligned}
$$

这是L^2的单体算符与双体算符之和的形式。

现在 $B = L^2, L_z, L_\pm$， $|b\rangle = |lm\rangle$， $a^+(b) = a^+_{lm}$，

利用
$$L^2|lm\rangle = l(l+1)\hbar^2|lm\rangle$$
$$L_z|lm\rangle = m\hbar|lm\rangle$$
$$L_\pm|lm\rangle = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)}\hbar|l, m \pm 1\rangle$$

代入到（**32.21**）式的相应单体和双体项中，容易得出

$$L^2 = \sum_{lm}\hbar^2 l(l+1)a^+_{lm}a_{lm} + \sum_{l'm'}\sum_{lm}\hbar^2 m'm a^+_{l'm'}a^+_{lm}a_{lm}a_{l'm'}$$
$$+ \sum_{l'm'}\sum_{lm}\hbar^2\sqrt{(l'-m')(l'+m'+1)}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}a^+_{l',m'+1}a^+_{l,m-1}a_{lm}a_{l'm'}$$

§32-5　例：反对称的自旋态

讨论一个自旋为**2**的全同粒子系统，共有**3**个粒子。这时物理量$\boldsymbol{B=S_z}$，其本征值和相应的消灭算符为

本征值	消灭算符
$b_1 = 2\hbar$（记为$\oplus$）	$a_2 = a_\oplus$
$b_2 = \hbar$ （记为 $+$）	$a_1 = a_+$
$b_3 = 0$ （记为 0）	$a_0 = a_0$
$b_4 = -\hbar$（记为$-$）	$a_{-1} = a_-$
$b_5 = -2\hbar$ (记为Θ）	$a_{-2} = a_\Theta$

状态|**3;** $b_1b_2b_3$>可以记为 $|\oplus +0\rangle$

|**3;** $b_2b_4b_5$>可以记为 $|+ -\Theta\rangle$

写成| $n_1n_2n_3n_4n_5$ >的形式则分别是|**11100**>与|**01011**>。

对于s=**2**的系统，几个自旋算符的二次量子化形式为

$$\hbar^{-1}S_z = 2a_\oplus^+ a_\oplus + a_+^+ a_+ - a_-^+ a_- - 2a_\Theta^+ a_\Theta$$

$$\hbar^{-1}S_+ = \sqrt{4}a_\oplus^+ a_+ + \sqrt{6}a_+^+ a_0 + \sqrt{6}a_0^+ a_- + \sqrt{4}a_-^+ a_\Theta$$

$$\hbar^{-1}S_- = \sqrt{4}a_+^+ a_\oplus + \sqrt{6}a_0^+ a_+ + \sqrt{6}a_-^+ a_0 + \sqrt{4}a_\Theta^+ a_-$$

而 $$S^2 = 6\hbar^2 \sum_{\sigma} a_\sigma^+ a_\sigma + \hbar^2 \sum_{\sigma}\sum_{\rho} \sigma\rho a_\sigma^+ a_\rho^+ a_\rho a_\sigma$$
$$+ \hbar^2 \sum_{\sigma}\sum_{\rho} \sqrt{(2-\sigma)(3+\sigma)}\sqrt{(2+\rho)(3-\rho)} a_{\sigma+1}^+ a_{\rho-1}^+ a_\rho a_\sigma$$

在上式取和中**σ**与**ρ**与分别取量子数+2，+1，0，-1，-2五值；而在下标上的**σ**与**ρ**则分别取相应的 $\oplus, +, 0, -, \ominus$

以（32.25）式最后一式为例

$$\because \quad S_-\left|sm\right\rangle = \sqrt{(s+m)(s-m+1)}\,|\,s, m-1\rangle$$

又当***s*=2**时， $m = 2, 1, 0, -1, -2$

S_-的二次量子化形式为

$$
\begin{aligned}
S_- &= \sum_{m'm} a_{m'}^{+} \langle sm' | g^{(1)} | sm \rangle a_m \\
&= \sum_{m'm} a_{m'}^{+} \langle sm' | \sqrt{(s+m)(s-m+1)}\hbar | s, m-1 \rangle a_m \\
&= \sum_{m'm} \sqrt{(s+m)(s-m+1)}\hbar \delta_{m',m-1} a_{m'}^{+} a_m \\
&= \sum_{m} \sqrt{(s+m)(s-m+1)}\hbar a_{m-1}^{+} a_m \\
&= \sqrt{4}\hbar a_1^{+} a_2 + \sqrt{6}\hbar a_0^{+} a_1 + \sqrt{6}\hbar a_{-1}^{+} a_0 + \sqrt{4}\hbar a_{-2}^{+} a_{-1} \\
&= \sqrt{4}\hbar a_{+}^{+} a_{\oplus} + \sqrt{6}\hbar a_0^{+} a_{+} + \sqrt{6}\hbar a_{-}^{+} a_0 + \sqrt{4}\hbar a_{\Theta}^{+} a_{-}
\end{aligned}
$$

现在讨论系统的一个反对称态

$$|\psi\rangle = |11100\rangle \qquad (32.27)$$

下降算符S_-逐次作用到这个态上，有

$$\left.\begin{aligned}
S_-|\Psi\rangle &= \sqrt{6}|11010\rangle \\
S_-^2|\Psi\rangle &= 6|10110\rangle + \sqrt{24}|11001\rangle \\
S_-^3|\Psi\rangle &= 12|01110\rangle + 24|10101\rangle \\
S_-^4|\Psi\rangle &= 72|01101\rangle + 24\sqrt{6}|10011\rangle \\
S_-^5|\Psi\rangle &= 120\sqrt{6}|01011\rangle \\
S_-^6|\Psi\rangle &= 720|00111\rangle \\
S_-^7|\Psi\rangle &= 0
\end{aligned}\right\} \qquad (32.28)$$

用算符S_z作用于（32.27）式以及（32.28）式中，可知它们都是S_z的本征态，对于（32.27）式的本征值为3，对于（32.28）式，本征值依次为2，1，0，-1，-2和-3。

证明$|\Psi\rangle = |11100\rangle$ 是S^2的本征态，即计算

$$S^2|\Psi\rangle = (S_A^2 + S_B^2 + S_C^2)|11100\rangle$$

可以证明 $$S_A^2|11100\rangle = 18\hbar^2|11100\rangle$$

$$S_B^2|11100\rangle = 4\hbar^2|11100\rangle$$

$$S_C^2\,|11100\rangle=\hbar^2\sum_{\sigma}\sum_{\rho}\sqrt{(2-\sigma)(3+\sigma)}\sqrt{(2+\rho)(3-\rho)}a_{\sigma+1}^{+}a_{\rho-1}^{+}a_{\rho}a_{\sigma}\left|11100\right\rangle$$

在上面对σ与ρ的取和中，肯定为零的情况有

$\sigma=\rho$ (因为有$a_\rho a_\sigma$,消灭两次)

$\sigma=\rho-2$ (因为有$a_{\sigma+1}^{+}a_{\rho-1}^{+}$,且$a_{\sigma+1}^{+}=a_{\rho-1}^{+}$,即产生两次)

$\sigma=2$ (因为有$a_{\sigma+1}^{+}$,而充其量是a_2^{+},无a_{2+1}^{+})

同时考虑到|11100>中后两个粒子数为零，剩下的组合只能是

σ	**1**	**0**	**1**
ρ	**2**	**1**	**0**

这样取和式只剩下三项

$$S_C^2\,|11100\rangle = \hbar^2 \begin{Bmatrix} 4a_{\oplus}^{+}a_{+}^{+}a_{\oplus}a_{+} \\ +6a_{+}^{+}a_{0}^{+}a_{+}a_{0} \\ +\sqrt{24}a_{\oplus}^{+}a_{-}^{+}a_{0}a_{+} \end{Bmatrix} \left|11100\right\rangle = \hbar^2 \begin{Bmatrix} 4a_{\oplus}^{+}a_{+}^{+}(-\,|00100\rangle) \\ +6a_{+}^{+}a_{0}^{+}\,|01000\rangle \\ +\sqrt{24}a_{\oplus}^{+}a_{-}^{+}\,|10000\rangle \end{Bmatrix} = -10\hbar^2\left|11100\right\rangle$$

代回（**32.29**）式得

$$S^2\left|11100\right\rangle = 12\hbar^2\left|11100\right\rangle = 3(3+1)\hbar^2\left|11100\right\rangle$$

可见，状态 $\left|\Psi\right\rangle = \left|11100\right\rangle$ 是**S2**的本征态，量子数为**3**。