高等量子力学

孙昌璞

中物院研究生院/北京计算科学研究中心

Beijing Computational Science Research Center (CSRC)

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“慧享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

第三章

多体系统及其二次量子化

“版权归中科院院士和中物院研究生院所有”
“慧享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载”

第3章：二次量子化及其应用

3.1 多粒子体系量子力学描述

3.2 全同多粒子体系的基本特征

3.3 量子态的二次量子化表示

3.4 力学量的二次量子化表示

3.5 薛定谔场的二次量子化

3.6 二次量子化的应用：爱因斯坦凝聚

3.7 对称性自发破缺与宏观量子态

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.1 多粒子体系描述

考虑两粒子的希尔伯特空间

$$\left\{|\psi_1^{[\alpha]}\rangle, |\psi_2^{[\alpha]}\rangle \ldots |\psi_{d_\alpha}^{[\alpha]}\rangle\right\}, \qquad \alpha = 1,2$$

张成了d_α维希尔伯特空间$V_{\alpha,}$则乘积态集合

$$\left\{|\psi_j^{[1]}\rangle \otimes |\psi_l^{[2]}\rangle \,|j = 1,2, \ldots d_1, l = 1,2, \ldots d_2\right\}$$

张成了两粒子体系希尔伯特空间的基矢

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

多粒子体系描述

两粒子波函数

$$\psi(x_1, x_2) = \langle x_1, x_2 | \psi \rangle$$

对任意态矢$|\phi\rangle$有

$$|\phi\rangle = \sum \langle \psi_j^{[1]} | \phi \rangle \, |\psi_j^{[1]}\rangle$$

$$\phi(x_1) = \langle x_1 | \phi \rangle = \sum_j \langle \psi_j | \phi \rangle \, \psi_j^{[1]}(x_1)$$

“固定”x_2，波函数可展开为

$$\psi(x_1, x_2)|_{x_2} = f(x_1) = \sum_j C_j(x_2) \psi_j^{[1]}(x_1)$$

“版权归小昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播，未经许可，请勿转载！”

多粒子体系描述

$$C_j(x_2) = \langle \psi_j^{[1]} | \psi \rangle = \int \psi_j^{*[1]}(x_1)\psi(x_1, x_2)\mathrm{d}x_1$$

进一步按V_2的基矢展开

$$C_j(x_2) = \sum C_{jl}\,\psi_l^{[2]}(x_2), \qquad \psi(x_1, x_2) = \sum C_{jl}\psi_j^{[1]}(x_1)\psi_l^{[2]}(x_2)$$

$$C_{jl} = \int \psi_l^{[2]*}(x_2)\, C_j(x_2) dx_2$$

$$= \int \psi_l^{[2]*}(x_2)\Big)\, \psi_j^{[1]*}(x_1)\psi(x_1, x_2)\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2$$

$$= \langle \psi_j^{[1]} \psi_l^{[2]} | \psi \rangle$$

则

$$|\psi\rangle = \sum C_{jl} \left|\psi_j^{[1]}\right\rangle \left|\psi_l^{[2]}\right\rangle$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

多粒子体系描述

无相互作用两粒子系统的哈密顿量

$$H = H_1(x_1) + H_2(x_2) \equiv H_1 \otimes I + I \otimes H_2$$

$$H_\alpha \left|\psi_n^{[\alpha]}\right\rangle = E_n(\alpha) \left|\psi_n^{[\alpha]}\right\rangle$$

总体的本征函数和本征值

$$\left|\psi_n^{[1]}\right\rangle \otimes \left|\psi_m^{[2]}\right\rangle \equiv |n, m\rangle$$

$$E_{nm} = E_n(1) + E_m(2)$$

“版权所有小昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播平台，未经许可，请勿转载！”

多粒子体系描述

有相互作用的体系

$$H = H_1(1) + H_2(2) + V(x_1, x_2)$$

$|m,n\rangle$不再是系统的本征函数。在该基矢上H表达为矩阵

$$H = \begin{bmatrix} E_{\beta=1} & V_{12} & \cdots & V_{\beta\beta'} \\ V_{21} & E_{\beta=2} & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ V_{\beta'\beta} & \cdots & \cdots & E_{\beta=N} \end{bmatrix}, \quad \beta = m, \beta' = n$$

$E_{mn} = E_n(1) + E_m(2)$，相互作用贡献了非对角元

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“仅享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.2 全同粒子的基本特征

粒子全同性要求交换体系中任何两个粒子，不会导致可观测的量子效应，如量子跃迁和量子干涉效应。

体系的哈密顿量

$$H = H(x_1, x_2 \dots x_{\mathrm{i}} \dots x_j \dots x_N)$$

在x_i换成x_j时是不变的，即H是关于粒子坐标的对称函数

$$H(\dots x_{\mathrm{i}} \dots x_j \dots) = H(\dots x_j \dots x_{\mathrm{i}} \dots)$$

可观测效应不变要求波函数的模方不变

$$|\psi(x_1, x_2 \dots x_{\mathrm{i}} \dots x_j \dots x_N)|^2 = |\psi(x_1, x_2 \dots x_j \dots x_{\mathrm{i}} \dots x_N)|^2$$

以上是讨论全同粒子系统的基本出发点

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.2全同粒子的基本特征

N粒子体系的波函数：

$$\psi = \psi(x_1, x_2, \ldots, x_N)$$

体系的哈密顿量：

$$H(x_1, x_2, \ldots, x_N) = \sum_{j=1}^{N} H_j(x_j) + \frac{1}{2}\sum_{i \neq j} V_{ij}(x_i, x_j)$$

第 j 个粒子的完备基矢：

$$|u_1(j)\rangle, |u_2(j)\rangle, \ldots, |u_d(j)\rangle$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“慧享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.2全同粒子的基本特征

N个粒子的基矢：

$$|u_{\alpha_1}, u_{\alpha_2}, \ldots, u_{\alpha_N}\rangle \equiv |u_1, u_2, \ldots, u_N\rangle$$
$$= |u_1(1)\rangle \otimes |u_2(2)\rangle \ldots |u_N(N)\rangle$$

将第i个粒子处于α_i态简记为$|u_i(i)\rangle$

交换粒子坐标 $x_i \rightarrow x_j$，得到另一个基矢

定义交换算子P_{ij}

$$P_{ij}|\ldots u_i(i), \ldots u_j(j)\rangle = |\ldots u_i(j), \ldots u_j(i), \ldots\rangle$$

“版权归孙昌璞院士和中科院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.2 全同粒子的基本特征

一般的置换（排列）算子

$$P=\begin{pmatrix}1,2,\ldots,N\\ r,s,\ldots,t\end{pmatrix}$$

$$P|u_1(1),u_2(2),\ldots u_N(N)\rangle\equiv|u_1(r),u_2(s),\ldots u_N(t)\rangle$$

置换的全体记为S，它构成所谓的置换群

$$P_{ij}=\begin{pmatrix}1 & \cdots & \mathrm{i} & \cdots & j & \cdots & N\\ 1 & \cdots & j & \cdots & \mathrm{i} & \cdots & N\end{pmatrix}$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.2 全同粒子的基本特征

置换的本征方程

$$P_{ij}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

$$P_{ij}^2 = 1 \Rightarrow |\psi\rangle = \left(P_{ij}\right)^2|\psi\rangle = \lambda^2|\psi\rangle \Rightarrow \lambda = \pm 1$$

$\lambda = +1$时，波函数为对称波函数，

$\lambda = -1$时，波函数为反对称波函数。

对称波函数描述自旋为整数的玻色子，

反对称描述自旋为半整数的费米子。

“版权归孙昌璞院士和中科院研究生院所有”
“蔻享学术仅供传播之用，未经许可，请勿转载！”

3.2 全同粒子的基本特征

玻色的对称基矢

$$|\psi_S\rangle \propto \sum_{P\in S_N} P|u_1(1),u_2(2),\ldots u_N(N)\rangle$$

将第i个粒子处于α_i态简记为$|u_i(i)\rangle$

对于任意$P' \in S_N$，　　$P'|\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle$

当P跑遍S_N时，$P'P$也跑遍S_N

——群重排定理

“版权归昌璞院士和物院研究生院所有”
“惠享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.2 全同粒子的基本特征

费米子——反对称基矢

$$|\psi_A\rangle \propto \begin{bmatrix} u_1(1), & u_2(1), & \dots & u_N(1) \\ u_1(2), & u_2(2), & \dots & u_N(2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_1(N) & \dots & \dots & u_N(N) \end{bmatrix}$$

$$P_{ij}\begin{bmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_1(i), & u_2(i), & \cdots & u_N(i) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_1(j), & u_2(j), & \cdots & u_N(j) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_1(j), & u_2(j), & \cdots & u_N(j) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_1(i), & u_2(i), & \cdots & u_N(i) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

$$= -\begin{bmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_1(i), & u_2(i), & \cdots & u_N(i) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_1(j), & u_2(j), & \cdots & u_N(j) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \Rightarrow P_{ij}|\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle$$

$$P|\psi_A\rangle = (-1)^{\delta_P}|\psi_A\rangle, \qquad \delta_P = \begin{cases} +1, & P\text{由偶数个}P_{ij}\text{构成} \\ -1, & P\text{由偶数个}P_{ij}\text{构成} \end{cases}$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“超享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.2 粒子的全同性：两粒子体系

有两个动量分别为k和q的粒子，其单粒子波函数

$$\psi_1(x_1)=\exp[\mathrm{i}kx_1]/\sqrt{2\pi},\psi_2(x_2)=\exp[\mathrm{i}qx_2]/\sqrt{2\pi}$$

二体波函数

$$\psi(x_1,x_2)=\frac{1}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx_1+\mathrm{i}qx_2}$$

采取质心–相对坐标

$$\begin{cases} x=x_1-x_2 \\ R=\dfrac{(x_1+x_2)}{2} \end{cases}, \qquad \begin{cases} x_1=R+\dfrac{x}{2} \\ x_2=R-\dfrac{x}{2} \end{cases}$$

“版权归孙昌璞院士和物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.2 粒子的全同性：两粒子体系

$$\begin{cases} K = k + q & \text{系统总动量} \\ p = \dfrac{1}{2}(k - q) & \text{相对动量} \end{cases}$$

$$\psi(x_1, x_2) \Rightarrow \psi(R, x) = \frac{1}{2\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i}KR} \mathrm{e}^{\mathrm{i}px}$$

质心运动　　相对运动

“版权归物理学院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.2 粒子的全同性：两粒子体系

反对称的费米子

$$\psi^A(x_1,x_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix}\psi_1(x_1) & \psi_1(x_2)\\ \psi_2(x_1) & \psi_2(x_2)\end{vmatrix}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)-\psi_1(x_2)\psi_2(x_1)]$$

$$=\frac{1}{2\pi}\mathrm{e}^{iKR}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px}\right)=\frac{1}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}KR}\sqrt{2}\mathrm{i}\sin(px)$$

相对运动波函数

$$\psi_p^A(x)\propto\sin(px)$$

代表两个粒子不愿意靠近。因为$x=0$时，几率为0

“版权归原子核物理研究所有，中物院研究生院所有，未经许可，请勿转载！”“总学术在线传播专用”

3.2 粒子的全同性：两粒子体系

交换对称的玻色子

$$\psi^S(x_1,x_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)+\psi_1(x_2)\psi_2(x_1)]$$

$$=\frac{1}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}KR}\sqrt{2}\cos(px)$$

$$\psi_p^S(x)\propto\cos(px)$$

代表两粒子倾向于靠近，因为$x=0$时，相对几率幅取最大值。

全同性原理：全同粒子体系能够出现的状态只能是对称态或反对称态，前者称为玻色子，后者称为费米子。

“版权归孙昌璞院士和物院研究生院所有”
“蔻享学术”传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.2 全同粒子的基本特征

全同粒子的哈密顿量

$$H(1,2,\ldots N)=\sum_{j=1}^{N}H(j)+\frac{1}{2}\sum_{\mathrm{i}\neq j}V(\mathrm{i},j)$$

具有交换不变性，

$$\dot{P_{kl}}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[P_{kl},H(1,2,\ldots N)]=0$$

全同性（玻色子或费米子）不会随时间改变。

全同性原理是量子力学一个新的假设，不能从其他原理推出。1942年，泡利进一步证明，为了在量子场论中不出现负几率，整数自旋粒子是玻色子，而半整数自旋粒子一定是费米子。

作业：写出三粒子体系的对称和反对称波函数。

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“慕享学人在线传播平台，未经许可，请勿转载！”

3.2 全同粒子的基本特征

全同性原理是量子力学一个新的假设，不能从其他原理推出。1942年，泡利进一步证明，为了在量子场论中不出现负几率，整数自旋粒子是玻色子，而半整数自旋粒子一定是费米子。

作业：写出三粒子体系的对称和反对称波函数。

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿下载！”

3.3玻色子量子态的二次量子化

多个粒子出现在同一个态中，Fock态（数态）

$$|\psi\rangle = |n_1, n_2, \ldots\rangle =$$

$$= \sqrt{\frac{n_1!\,n_2!\cdots n_N!}{N!}} \sum_{P'} P' \,|\underbrace{u_1(1)u_1(2)\ldots u_1(n_1)}_{n_1\text{个}};\underbrace{u_2(n_1+1)\ldots u_2(n_1+n_2)}_{n_2\text{个}};\ldots\rangle$$

$$n_1 + n_2 + \cdots + n_N = N$$

P' 是对N个态中不同单粒子态不同排列求和

$N!$个态，重复次数：$n_1!\,n_2!\cdots n_N!$

独立态的个数：$\dfrac{N!}{n_1!\,n_2!\cdots n_N!}$

"版权归中物院研究生院所有"
"蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！"

3.3玻色子量子态的二次量子化

利用置换群语言

$$|\psi\rangle = \sqrt{\frac{1}{N!\,(n_1!\,n_2!\cdots n_N!)}} \sum_{P\in S(N)} P\,|\underbrace{u_1(1)u_1(2)\ldots u_1(n_1)}_{n_1\text{个}};\underbrace{u_2(n_1+1)\ldots u_2(n_1+n_2)}_{n_2\text{个}};\ldots\rangle$$

$$n_1 + n_2 + \cdots + n_N = N$$

P是对置换群$S(N)$的所有元素求和，其中相同的项数为

$$n_1!\,n_2!\cdots n_N!$$

归一化系数

$$\frac{1}{(n_1!\,n_2!\cdots n_N!)}\sqrt{\frac{n_1!\,n_2!\cdots n_N!}{N!}} = \sqrt{\frac{1}{N!\,(n_1!\,n_2!\cdots n_N!)}}$$

“版权归孙昌璞院士和物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.3 量子态的二次量子化

例子 $N=3,\quad n_1=2, n_2=1$

$$|\psi\rangle = |n_1=2, n_2=1\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{1}{3!\,(2!\,1!)}} \sum_{P\in S(3)} P|u_1(1)u_1(2)\,u_2(3)\rangle$$

$$= \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} u_1(1)u_1(2)u_2(3)+u_1(1)u_1(3)u_2(2)+u_1(2)u_1(1)u_2(3) \\ +u_1(2)u_1(3)u_2(1)+u_1(3)u_1(2)u_2(1)+u_1(3)u_1(1)\,u_2(2)\end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{3}}\left(2u_1(1)u_1(2)u_2(3)+2u_1(1)u_1(3)u_2(2)+2u_1(2)u_1(3)u_2(1)\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3}}[u_1(1)u_1(2)u_2(3)+u_1(1)u_1(3)u_2(2)+u_1(2)u_1(3)u_2(1)]$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
遵守学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

玻色子态的二次量子化表示

$\{u_j|j \in I\}$是玻色子单粒子态空间的基矢,则

$$|u_1(1), u_2(2), \ldots u_n(n) \ldots u_N(N)\rangle = |u_1(1)\rangle \otimes |u_2(2)\rangle \otimes \cdots \otimes |u_N(N)\rangle$$

张成了N粒子态空间$V^{(N)}$

整个玻色子的态空间是一个阶化空间（granded space）

——巨希尔伯特空间

$$V = V^{(0)} \oplus V^{(1)} \oplus \cdots V^{(N)} \oplus \cdots \equiv \sum \oplus V^{(n)}$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

玻色子态产生算子

在V上定义产生算子$a_j^+ \in End(V)$

$$a_j^+ = \sum_{N=0}^{\infty} \widetilde{\oplus}\, a_j^+(N+1),$$

$$a_j^+(N+1) = \frac{1}{\sqrt{N+1}} \sum_{l=1}^{N+1} p_{N+1,l} \left| u_j(N+1) \right\rangle$$

把N粒子态映射为$N+1$粒子态

$$a_j^+(N+1): V^{(N)} \to V^{(N+1)}$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

玻色子态的消灭算子

在V上定义消灭算子$a_j \in End(V)$

$$a_j = \sum_{N=1}^{\infty} \widetilde{\oplus} a_j$$

$$a_j(N) = \frac{1}{\sqrt{N}} \langle u_j(N) | \sum_{l=1}^{N} p_{Nl}$$

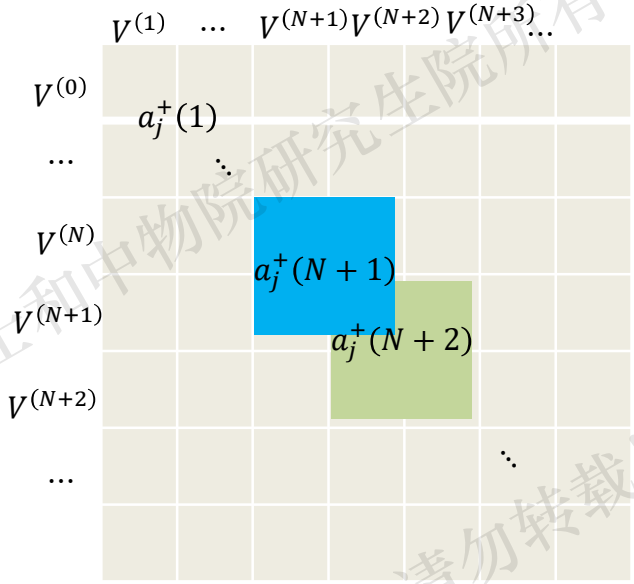
把N粒子态映,射为$N-1$粒子态，即

$$a_j(N): V^{(N)} \to V^{(N-1)}$$

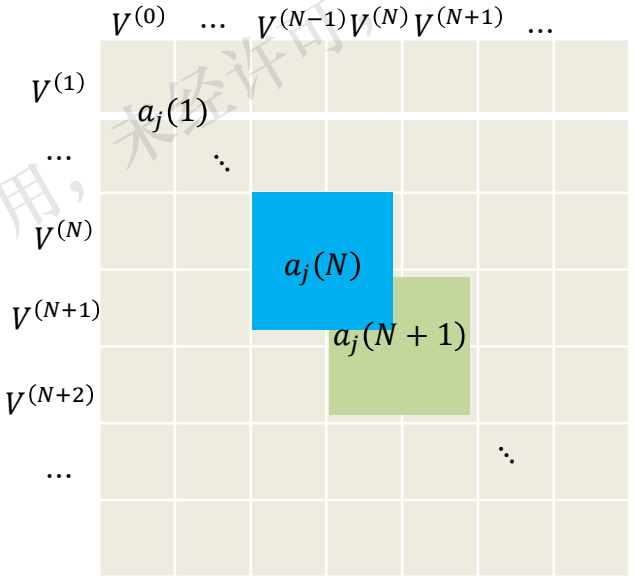
“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

“⊕”的意义

$$a_j^+ = \begin{pmatrix} 0 & x_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & x_2 & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & x_N \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} =$$



$$a_j = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x_1 & \ddots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & x_2 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & x_N & 0 \end{pmatrix} =$$



“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

将基矢作为算子

在产生消灭算子中，将态矢$|u_j(l)\rangle$和$\langle u_j(N)|$看作V上的算符

$$|u\rangle \to A_u^+: \quad A_u^+|\phi\rangle = |\phi\rangle \otimes |u\rangle$$

$$\langle u| \to A_u: \quad A_u|\phi\rangle = \langle u|\phi\rangle$$

其中

$$|\phi\rangle = |u_1\rangle \otimes \cdots \otimes |u_N\rangle \in V^N$$

于是

$$A_u^+|\phi\rangle = |u_1\rangle \otimes \cdots \otimes |u_N\rangle \otimes |u\rangle \in V^{N+1}$$

$$A_u|\phi\rangle = |u_1\rangle \otimes \cdots \otimes \langle u|u_k\rangle \otimes \cdots \otimes |u_N\rangle \in V^{N-1}$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

玻色子态的产生消灭

巨空间的$N+1$粒子产生算符进一步明确定义为

$$\tilde{a}_j^+(N+1)=\sum_{M=0}^{\infty}\widetilde{\oplus}\, a_j^+(M+1)\delta_{M,N}$$

巨空间的N粒子消灭算符

$$\tilde{a}_j(N)=\sum_{M=1}^{\infty}\widetilde{\oplus}\, a_j(M)\delta_{M,N}$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

玻色子态的二次量子化表示

$$|\ldots n_j \ldots\rangle \equiv |n_1, n_2, \ldots n_j \ldots\rangle \quad (n_1 + n_2 + \cdots n_N = N)$$

$$= \sqrt{\frac{1}{N!\,(n_1!\,n_2!\cdots n_N!)}} \sum_{p\in S(N)} p|u_1(1)\ldots u_1(n_1); u_2(n_1+1)\ldots u_2(n_1+n_2); \ldots\ldots;$$
$$u_j(\ldots+1), u_j(\ldots+2)\ldots u_j(\ldots+n_j)\ldots\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{1}{N!\,(n_1!\,n_2!\cdots n_N!)}} \sum_{p\in S(N)} p|\ldots u_j(\ldots+1), u_j(\ldots+2)\ldots u_j(\ldots+n_j)\ldots\rangle$$

其中

$$u_j(+k) = u_j\left(n_1 + \cdots + n_{j-1} + k\right), k = 1,2,\cdots, n_j$$

$$a_j|\ldots n_j \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\langle u_j(N)|\sum_{j=1}^{N} p_{Nj}|\ldots n_j \ldots\rangle$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“慧享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

玻色子态的二次量子化表示

因为任何置换作用到对称态上，状态不改变，即

$$p_{Nj}|\ldots n_j \ldots\rangle = |\ldots n_j \ldots\rangle, \qquad \sum P_{Nj} = N$$

$a_j|\ldots n_j \ldots\rangle$

$$= \sqrt{\frac{1}{N!\,(\cdots n_j!\cdots)}}\frac{1}{\sqrt{N}}N\sum_{p\in S(N)}\langle u_j(N)|\ p|u_j(N)\rangle|u_1(1)\ldots u_1(n_1)\ldots \underbrace{u_j(+1)\cdots u_j(n_j)}_{n_j-1\text{个}};\ldots\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{1}{(N-1)!\,(\cdots n_j!\cdots)}}n_j\langle u_j(N)|u_j(N)\rangle \sum_{p'\in S(N-1)} p'\,|u_1(1)\ldots u_1(n_1)\ldots \underbrace{u_j(+1)\cdots u_j(n_j)}_{n_j-1\text{个}};\ldots\rangle$$

$$= \sqrt{n_j}\sqrt{\frac{1}{(N-1)!\,(\cdots (n_j-1)!\cdots)}} \sum_{p'\in S(N-1)} p'\,|u_1(1)\ldots u_1(n_1)\ldots \underbrace{u_j(+1)\cdots u_j(n_j)}_{n_j-1\text{个}};\ldots\rangle$$

$$= \sqrt{n_j}|\ldots n_j - 1\ldots\rangle$$

$$\Rightarrow a_j|\ldots n_j \ldots\rangle = \sqrt{n_j}|\ldots n_j - 1\ldots\rangle$$

“版权归昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载”

玻色子态的二次量子化表示

考虑产生算子作用于对称化态的结果

$$\sum_{l=1}^{N+1} P_{N+1,l} \sum_{p\in S(N)} p = \sum_{p'\in S(N+1)} p'$$

$$a_j^+ |\dots n_j \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{N+1}} \sqrt{\frac{1}{N!\left(\cdots n_j! \cdots\right)}} \sum_l P_{N+1,l} \sum_{p\in S(N)} p |\dots u_j(+1), \dots u_j(+n_j), u_j(N+1) \dots\rangle$$

$$a_j^+ |\dots n_j \dots\rangle = \sqrt{\frac{1}{(N+1)!\left(\cdots n_j! \cdots\right)}} \sum_{p\in S(N+1)} p\{\dots |u_j(+1)\rangle \otimes \cdots |u_j(+n_j)\rangle \otimes |u_j(N+1)\rangle\}$$

$$= \sqrt{n_j+1} \sqrt{\frac{1}{(N+1)!\left(\cdots (n_j+1)! \cdots\right)}} \sum_{p\in S(N+1)} p\{\dots |u_j(+1)\rangle \otimes \cdots |u_j(+n_j)\rangle \otimes |u_j(N+1)\rangle\}$$

$$= \sqrt{n_j+1} |\dots, n_j+1, \dots\rangle$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播平台，未经许可，请勿下载！”

玻色子态的二次量子化表示

$$a_j^{+}|\ldots n_j \ldots\rangle = \sqrt{n_j+1}|\ldots, n_j+1, \ldots\rangle$$

$$a_j|\ldots n_j \ldots\rangle = \sqrt{n_j}|\ldots, n_j-1, \ldots\rangle$$

考虑到在基矢上的两项作用，可以证明

$$[a_j, a_l^{+}] = \delta_{jl}, [a_j, a_l] = 0$$

所有粒子数$n_j = 0$的状态称为真空态

$$|0\rangle \equiv |n_1 = 0, n_2 = 0, \ldots n_j = 0, \ldots\rangle a_j|0\rangle = 0$$

与正则量子化的谐振子基态类似。

其它的激发态可以构造为

$$|n_1, n_2, \ldots n_j \ldots\rangle = \frac{a_1^{+n_1} a_2^{+n_2} \ldots a_j^{+n_j}}{\sqrt{n_1! \, n_2! \ldots n_j!}}|0\rangle$$

“版权归苏州国璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

二次量子化的含义

把基于a_j和a_j^+的表征方法叫二次量子化，是因为我们

把态$|u_j\rangle$当作巨希尔伯特空间上的一个算子：

$$\forall|\phi\rangle \in V, O(|u_j\rangle)|\phi\rangle = |\phi\rangle \otimes |u_j\rangle$$

$\langle u_j(N)|$也可以看成巨希尔伯特空间上的一个算子

$$\forall|\phi\rangle \in V, O(\langle u_j|)|\phi\rangle \otimes |\phi'\rangle = \langle u_j|\phi\rangle|\phi'\rangle$$

这种算子只能定义在阶化空间—巨希尔伯特空间上，它们的作用是产生或消灭粒子

“版权归孙昌璞院士和物院研究生院所有”
“慧学术在线直播专用，未经许可，请勿转载！”

二次量子化与谐振子正则量子化的区别

多粒子Fock态，形式与正则量子化的谐振子本征态一样，但本质不一样。例如谐振子

$$H = \hbar\omega a^{+}a, \qquad x \cong a + a^{+}, \qquad p \sim a - a^{+}$$

x, p 是 a, a^{+} 的一次型；在二次量子化框架下，x, p是a, a^{+}的二次型：

$$x \sim \sum_{mn} x_{mn}\, a_m^{+} a_n, \qquad p \sim \sum_{mn} p_{mn}\, a_m^{+} a_n$$

“版权归万昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

费米子态的二次量子化表示

费米子体系波函数是反对称的，即

$$\psi_A \equiv |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_n} (-1)^{\delta_P} P\left(u_1(1) u_2(2) \ldots u_N(N)\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_1(1) & u_2(1) & \ldots & u_N(1) \\ u_1(2) & u_2(2) & \ldots & u_N(2) \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ u_1(N) & u_2(N) & \ldots & u_N(N) \end{vmatrix}$$

将第i个粒子处于α_i态简记为$|u_i(i)\rangle$

$$a_j = \left[a_j^+\right]^+ = \langle u_j(N)| \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j (-1)^{\delta P_{Nj}} \cdot P_{Nj}$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

费米子态的二次量子化表示

$(-1)^{\delta P_{Ni}} P_{Ni}$作用在反对称态上相当于单位算子；

a_j, a_j^+作用在费米子Fock空间上得到：

$$a_j|\dots n_j \dots\rangle = (-1)^{N+1}(-1)^{\sum_{l=1}^{j-1} n_l} \cdot n_j|\dots n_j - 1, \dots\rangle$$

$$a_j^+|\dots n_j \dots\rangle = (-1)^{N}(-1)^{\sum_{l=1}^{j-1} n_l} \cdot (1 - n_j)|\dots n_j + 1, \dots\rangle$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有，未经许可，请勿转载！”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

费米子态的二次量子化表示

证 明

设在“行列式”Ψ_A中，u_j处于第α列上，

可通过交换把它换到第一列，得

$$|\ldots n_j \ldots\rangle$$

$$= \boxed{(-1)^{\sum_{l=1}^{j-1} n_l}} \cdot \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{bmatrix} u_j(1) & u_1(1) & u_2(1) & \cdots & u_N(1) \\ u_j(2) & u_1(2) & u_2(2) & \cdots & u_N(2) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ u_j(N) & u_1(N) & u_2(N) & \cdots & u_N(N) \end{bmatrix}$$

$(-1)^{n_1}$ $(-1)^{n_2}$ $(-1)^{n_{j-2}}$ $(-1)^{n_{j-1}}$

“版权归孙昌璞院士和物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播若用，未经许可，请勿转载！”

费米子态的二次量子化表示

显然

$$(-1)^{\delta P_{Ni}} \cdot P_{Ni}|\dots n_j \dots\rangle = \begin{cases} -P_{Ni}|\dots n_j \dots\rangle = |\dots n_j \dots\rangle, N \neq i \\ P_{NN}|\dots n_j \dots\rangle = |\dots n_j \dots\rangle, N = i \end{cases}$$

作用在反对称态上

$$\sum (-1)^{\delta P_{Ni}} \cdot P_{Ni} = \sum 1 = N$$

$$\boxed{a_j = \sqrt{N}\langle u_j(N)|}$$

版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

费米子态的二次量子化表示

可以明显地看出

(i) $u_j \notin \{u_1, u_2 \ldots u_N\},\ a_j|\ldots n_j \ldots\rangle = 0$

证 明

$$a_j|\ldots n_j \ldots\rangle = \sqrt{N}\langle u_j(N)| \sum_{P\in S_n} (-1)^{\delta_P} P\big(u_1(1)u_2(2)\ldots u_N(N)\big)$$

$$= \sum_{i\neq j}^{i=1,\cdots,N} \sum_{P\in S_{n-1}} (-1)^{\delta_P} P\big(u_1(1)u_2(2)\ldots u_{N-1}(N-1)\big)\langle u_j(N)|u_i(N)\rangle$$

$$= 0$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“分享学术在线传播使用，未经许可，请勿转载！”

费米子态的二次量子化表示

(ii) $u_j \in \{u_1, u_2 \dots u_N\}$，由Laplace定理，按$u_j$态把$\Psi_A$展开

$$|\dots n_j \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}(-1)^{\sum_{j=1}^{j-1} n_j}\left\{\begin{matrix}(-1)^{N+1}|u_j(N)\rangle \cdot A(N) + (-1)^N|u_j(N-1)\rangle \cdot A(N-1) + \\ \dots(-1)^{i+1}|u_j(i)\rangle \cdot A(i) + \cdots (-1)^2|u_j(1)\rangle \cdot A(1)\end{matrix}\right\}$$

其中$A(i)$为$u_j(i)$的代数余子式

$$a_j|\dots n_j \dots\rangle = (-1)^{N+1}(-1)^{\sum_{l=1}^{j-1} n_l}\frac{\sqrt{N}}{\sqrt{N!}}\langle u_j(N)|u_j(N)\rangle \cdot A(N)$$

$$= (-1)^{N+1}(-1)^{\sum_{l=1}^{j-1} n_l}|\dots n_j - 1 \dots\rangle$$

同理证：

$$a_j^+|\dots n_j \dots\rangle = (-1)^N(-1)^{\sum_{l=1}^{j-1} n_l}(1-n_j)|\dots n_j + 1 \dots\rangle$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“限学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

费米子态的二次量子化表示

$$a_j|\ldots n_j\ldots\rangle=(-1)^{N+1}(-1)^{\sum_{l=1}^{j-1}n_l}\cdot n_j|\ldots n_j-1,\ldots\rangle$$

由

$$a_j^+|\ldots n_j\ldots\rangle=(-1)^{N+1}(-1)^{\sum_{l=1}^{j-1}n_l}\cdot(1-n_j)|\ldots n_j+1,\ldots\rangle$$

得到费米子代数

$$\{a_j,a_l^+\}=\delta_{jl},\qquad \{a_j,a_l\}=0=\{a_j^+,a_l^+\}$$

$$\Rightarrow a_j^2=0=a_l^2$$

定义粒子数算子：

$$N_j=a_j^+a_j$$

命 题：N_j的本征值只能为0或1

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“慧享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

费米子态的二次量子化表示

证 明

$$N_j|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

$$N_j^2 = a_j^+ a_j a_j^+ a_j = a_j^+(1 - a_j^+ a_j)a_j = a_j^+ a_j = N_j$$

其中用到了$a_j^2 = 0$

$$\left.\begin{aligned} N_j^2|\lambda\rangle &= \lambda N_j|\lambda\rangle = \lambda^2|\lambda\rangle \\ N_j^2|\lambda\rangle &= N_j|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \end{aligned}\right\} \Rightarrow \lambda^2 = \lambda \Rightarrow \lambda = 0,1$$

费米子系统Fock空间可以构造为

$$\left\{ |n_j \ldots\rangle = \prod_{j=1}^{N} a_j^{+n_j} |0\rangle \middle| n_j = 0,1 \right\}$$

$|0\rangle = |n_1 = 0, \ldots n_j = 0\rangle$:费米子的真空态

“版权归姚昌璞院士和中科院研究生院所有，未经许可，请勿转载！”
“寇享学术在线传播专用”

3.4 力学量的二次量子表示

二次量子化本质上可以看成是多粒子系统的一种表象变换。

因此，在全同粒子态的二次量子化基础上，讨论力学量或算符的二次量子化。先分析玻色子情况。

$$\sum_{j=1}^{N}|m(j)\rangle\langle n(j)| = a_m^+ a_n$$

简化记号 $|u_m(j)\rangle \equiv |m(j)\rangle$

“版权归孙昌璞院士和中科院研究生院所有”
“慧享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.4 力学量的二次量子表示

证明

对于置换算子P_{jl}

$$P_{jl}P_{lj}=1$$

$$\begin{aligned}&P_{Nj}|m(j)\rangle\left(\cdots\phi(j)\phi'(N)\right)\\&=|m(N)\rangle\left(\cdots\phi(N)\phi'(j)\right)\\&=|m(N)\rangle P_{Nj}\left(\cdots\phi(j)\phi'(N)\right)\end{aligned}$$

$$\Rightarrow P_{Nj}|m(j)\rangle=|m(N)\rangle P_{Nj},$$

$$P_{Nj}\langle n(j)|=\langle n(N)|P_{Nj}$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.4 力学量的二次量子表示

$$\sum_{j=1}^{N}|m(j)\rangle\langle n(j)| = \sum_{j=1}^{N}|m(j)\rangle P_{Nj}P_{Nj}\langle n(j)| = \sum_{j=1}^{N}P_{Nj}|m(N)\rangle\langle n(N)|P_{Nj}$$

作用在对称态上 $P_{Nj}=1,\ \sum P_{Nj}=N$

$$\langle n(N)| = \langle n(N)|\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}P_{Nj}$$

$$a_m^+ a_n = a_m^+(N)a_n(N) = \left(\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}P_{Nj}|m(N)\rangle\right)\langle n(N)|\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}P_{Nj}$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“慧享学术”线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.5单体算符力学量二次量子表示

单体算符力学量

$$f(j)=\sum_{\alpha\beta}|\alpha(j)\rangle\langle\beta(j)|\langle\alpha|f|\beta\rangle \qquad f_{mn}=\langle m|f|n\rangle$$

相应的单体算符(single-body operator)

$$F=\sum_{j=1}^{N}f(j)$$

$$F=\sum_{j=1}^{N}\sum_{mn}|m(j)\rangle\langle n(j)|\langle m|f|n\rangle$$

$$=\sum_{m,n}\sum_{j}|m(j)\rangle\langle n(j)|f_{mn}=\sum_{mn}f_{mn}\,a_m^{+}a_n$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.5单体算符力学量二次量子表示

已积分掉指标变量j，故f_{mn}与j无关

对连续变量情况

$$f(j)=f(x_j)$$

$$f_{mn}=\int u_m^*(x_j)f(x_j)u_n(x_j)dx_j$$

单体算子 F 二次量子化表示

$$F=\sum_{mn} f_{mn}\,a_m^+ a_n$$

“版权归孙昌璞老师和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.5 力学量的二次量子表示

对于二体相互作用或称二体算子(two-body operator)

$$W=\sum_{jl}W(jl)=\sum_{mnrs,jl}W_{mnrs}\,|m(j)\rangle\,|n(l)\rangle\langle r(j)|\langle s(l)|$$

$$=\sum_{mnrs,j}|m(j)\rangle\Big(\sum_{l}|n(l)\rangle\langle s(l)|\Big)\langle r(j)|W_{mnrs}$$

$$W=\sum_{mnrs}W_{mnrs}\,a_m^{+}a_n^{+}a_r a_s$$

对于费米子情况，可以得到相同表达式（作业题）。

“版权归北京璞院士和中物院研究生院所有”
“慧学学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.5 力学量的二次量子表示

二体相互作用多体系统哈密顿量为

$$H = \sum T(\mathrm{i}) + \sum_{jl} W(jl)$$

二次量子化形式为

$$H = \sum T_{mn}\, a_m^+ a_n + \sum_{mnrs} W_{mnrs}\, a_m^+ a_n^+ a_r a_s$$

这个普适形式也适用于费米子情况。

例子

$$T(i) = \frac{p_i^2}{2m} + V(x_i)$$

$$W(j,l) = \xi / |r_j - r_l|$$

“版权归孙昌璞院士和中国科学院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

费米子力学量二次量子化

对于全同费米子系统，先证明

$$\sum_{j=1}^{N}|m(j)\rangle\langle n(j)| = a_m^+ a_n$$

证 明

因为

$$P_{Nj}P_{Nj} = 1, \qquad |m(j)\rangle P_{Nj} = P_{Nj}|m(N)\rangle, P_{Nj}\langle n(j)| = \langle n(N)|P_{Nj}$$

可以把上式理解成巨希尔伯特空间上算子的幺正变换，

$$P_{Nj}|m(N)\rangle P_{Nj}^+ = |m(j)\rangle$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术”线传播专用，未经许可，请勿转载！”

费米子力学量二次量子化

$$\sum_{j=1}^{N}|m(j)\rangle\langle n(j)| = \sum_{j=1}^{N}|m(j)\rangle\left[(-1)^{\delta P_{Nj}}P_{Nj}\right]\left[(-1)^{\delta P_{Nj}}P_{Nj}\right]\langle n(j)|$$

$$= \sum_{j=1}^{N}(-1)^{\delta P_{Nj}}P_{Nj}|m(j)\rangle\langle n(j)|\,(-1)^{\delta P_{Nj}}P_{Nj}$$

由于算符只作用在反对称态上，我们有

$$(-1)^{\delta P_{Nj}}P_{Nj} = 1 \qquad \sum_{j=1}^{N}(-1)^{\delta P_{Nj}}P_{Nj} = N$$

$$\sum_{j=1}^{N}|m(j)\rangle\langle n(j)| = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}(-1)^{\delta P_{Nj}}P_{Nj}|m(N)\rangle\langle n(N)|\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}(-1)^{\delta P_{Nj}}P_{Nj} = a_m^{+}a_n$$

“版权归孙昌璞院士和计物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播使用，未经许可，请勿转载！”

费米子力学量二次量子化

费米子单体算符$A=\sum_{j=1}^{N}\bar{A}(j)$的二次量子化：

$$A=\sum_{j=1}^{N}\sum_{mn}|m(j)\rangle\langle m|\bar{A}|n\rangle\langle n(j)|=\sum_{mn}a_m^{+}A_{mn}a_n$$

对于两粒子算符(two-body operator)

$$W=\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}W(ij)=\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\sum_{mnrs}|m(i)\rangle|n(j)\rangle\langle mn|W|rs\rangle\langle r(j)|\langle s(i)|$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{mnrs}a_m^{+}a_n^{+}a_r a_s W_{mnrs}$$

版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

费米子力学量二次量子化

费米系统的哈密顿算符二次量子化为

$$H = \sum_{i} T(i) + \sum_{i \neq j} W(ij)$$

$$= \sum_{mn} a_m^+ T_{mn} a_n + \frac{1}{2} \sum_{mnrs} a_m^+ a_n^+ a_r a_s W_{mnrs}$$

$$T_{mn} = \langle m|T|n\rangle = \epsilon_m \delta_{mn}$$

二次量子化的哈密顿量为

$$H = \sum_{m} a_m^+ a_m \epsilon_m + \frac{1}{2} \sum_{mnrs} a_m^+ a_n^+ a_r a_s W_{mnrs}$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.5 场的二次量子化

在幺正变换下

$$|m\rangle = \sum_{\bar{n}} \langle \bar{n}|m\rangle |\bar{n}\rangle \qquad \{|\bar{n}\rangle\} \quad \rightarrow \quad \{|m\rangle\}$$

产生消灭算子的定义为

$$a_m^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} P_{Nj} \, |m(N)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} P_{Nj} \sum_{\bar{n}} \langle \bar{n}|m\rangle |\bar{n}(N)\rangle$$

$$= \sum_{\bar{n}} \langle \bar{n}|m\rangle \sum_{j} \frac{1}{\sqrt{N}} P_{Nj} |\bar{n}(N)\rangle = \sum_{\bar{n}} \langle \bar{n}|m\rangle b_{\bar{n}}^+$$

$$a_m^+ = \sum_{\bar{n}} \langle \bar{n}|m\rangle b_{\bar{n}}^+ , \qquad b_{\bar{n}}^+ = \sum_{m} \langle m|\bar{n}\rangle a_m^+$$

$$\{a_m, a_m^+\} \rightleftarrows \{b_{\bar{n}}, b_{\bar{n}}^+\}$$

版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线直播专用，未经许可，请勿下载！”

3.5 场的二次量子化

直接计算验证

$$[b_{\bar{n}}, b^{+}_{\bar{n}'}] = \delta_{\bar{n}\bar{n}'} \qquad [b_{\bar{n}}, b_{\bar{n}'}] = 0$$

$$[b_{\bar{n}}, b^{+}_{\bar{n}'}] = \left[\sum_{m}\langle\bar{n}|m\rangle a_m \,, \sum_{m'}\langle m'|\bar{n}'\rangle a^{+}_{m}\right]$$

$$= \sum_{m,m'}\langle\bar{n}|m\rangle\langle m'|\bar{n}'\rangle\,[a_m, a^{+}_{m}]$$

$$= \sum_{m,m'}\langle\bar{n}|m\rangle\langle m'|\bar{n}'\rangle\,\delta_{mm'} = \sum_{m}\langle\bar{n}|m\rangle\langle m'|\bar{n}'\rangle$$

$$= \langle\bar{n}|\bar{n}'\rangle = \delta_{\bar{n}\bar{n}'}$$

“版权归中国科学院院士和中科院研究生院所有”
“蔻享学术”在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.5 场的二次量子化

定义坐标表象中的产生消灭算子

$$\varphi(x) \equiv a_x = \sum \langle x|m\rangle\, a_m \equiv \sum \varphi_m(x) a_m$$

$\varphi_m(x) = \langle x|m\rangle$　是原来状态的坐标表示

$$\varphi^+(x) \equiv a_x^+ = \sum \varphi_m^*(x) a_m^+$$

$$[\varphi(x), \varphi^+(x')] = \sum_{mn} \langle x|m\rangle\langle n|x'\rangle\, [a_m, a_n^+]$$

$$= \sum_{mn} \langle x|m\rangle\langle n|x'\rangle\, \delta_{mn}$$

$$= \langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.5 场的二次量子化

场算子的对易关系

$$[\varphi(x), \varphi^+(x')] = \delta(x - x')$$
$$[\varphi^+(x), \varphi^+(x')] = 0 = [\varphi(x), \varphi(x')]$$

从物理意义上讲，$\varphi(x)\left(\varphi^+(x)\right)$代表在$x$点消灭（产生）一个粒子

$$\varphi^+(x)|0\rangle = \sum_m \varphi_m^*(x)|m\rangle \equiv |x\rangle$$

$\varphi^+(x)$在真空态上产生一个位置本征态

“版权所有 孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“慕享学堂在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.5 场的二次量子化

坐标表象下的相互作用多体哈密顿量

$$H=\int dxdx'\varphi^{+}(x)H_0\,\varphi(x')+\int dxdx'dx''dx'''W(xx'x''x''')\,\varphi^{+}(x)\varphi^{+}(x')\varphi(x'')\varphi(x''')$$

$$H_0=\frac{p^2}{2m}+V(\mathrm{x})$$

$$H_{0xx'}=\left(\frac{p^2}{2m}+V(x)\right)_{xx'}=\frac{\langle x|p^2|x'\rangle}{2m}+V(x)\delta_{xx'}$$

哈密顿量的场算子表示

$$H=\int dx\varphi^{+}(x)\left(\frac{p_x^2}{2m}+V(x)\varphi(x)+\cdots\right)$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.5 场的二次量子化

考察场算子的运动方程（没有相互作用）

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(x)=[\varphi(x),H]=\int \mathrm{d}x'\,[\varphi(x),\varphi^{+}(x')]H_0\varphi(x')$$

$$=\int \mathrm{d}x'\left[\delta(x-x')\left(\frac{p^2}{2m}+V(x')\right)\right]\varphi(x')$$

$$=\left(\frac{p^2}{2m}+V(x)\right)\varphi(x)$$

即场算子满足形式与薛定谔方程一样的运动方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(x)=\left(\frac{p^2}{2m}+V(x)\right)\varphi(x)$$

把单粒子波函数看成满足标准对易关系的场算子，得到多粒子的“二次量子化”表示。

这就是我们为什么把上述表示叫“二次量子化”的另一个原因。

“版权由孙昌璞院士和中物院研究生院所有”，未经许可，请勿转载！”

总结：场量子化方法

（1）对于单粒子本征态$u_j(x)$

$$\bar{H}_0 u_n(x) = \epsilon_n u_n(x)$$

我们引入了场算子量子化

$$\varphi(x) = \sum u_n^*(x) a_n$$

$$[a_n, a_m^+] = \delta_{mn}$$

这就是说，场量子化是把任何一个波包的本征态展开中的系数换成算子。

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播之用，未经许可，请勿转载！”

总结：场量子化方法

（2）谐振子的正则量子化中的产生消灭算子

$$a^+ \sim (x + ip), \quad a \sim (x - ip)$$

不同于二次量子化中的产生消灭算子，例如在“粒子数表象”下

$$\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle$$

二次量子化哈密顿量为

$$H = \sum_n \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega a_n^+ a_n \equiv \sum_n \hbar\omega a_n^+ a_n$$

“版权归科学出版社和中物院研究生院所有”
“慧享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

总结：场量子化方法

但是对于多模的谐振子集合

$$H = \sum_{n=1}^{N} \left(\frac{p_n^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_n^2 x_n^2 \right)$$

定义 $a_n^+ \sim (x_n + \mathrm{i}p_n), \qquad a_n \sim (x_n - \mathrm{i}p_n)$

则有与二次量子化一样的哈密顿量。

从这个意义上讲，我们通常说，玻色子场量子化系统等价于多模谐振子系统。

“版权归孙昌璞院士和物院研究生院所有”
“蔻享学术”线传播使用，未经许可，请勿转载！”

3.6 二次量子化应用：玻色爱因斯坦凝聚

“版权所有，吴昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载”

相互作用玻色子模型与G-P方程

最简单的相互作用玻色子模型

$$W(\vec{r}\,,\vec{r}\,') = g\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$$

$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$ ——s分波散射截面a定义的耦合强度

二次量子化形式

$$H = \int \mathrm{d}^3 r \Phi^+(r)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\Phi(r) + \frac{1}{2}g\int d^3 r\, \Phi^+(r)\Phi^+(r)\Phi(r)\Phi(r)$$

$V(r)$是原子的囚禁势。

版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有
“蔻享学术”线传播专用，未经许可，请勿转载！

相互作用玻色子模型与G-P方程

运动方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi(r,t)=[\Phi(r,t),H]$$

给出

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi(r)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)\right]\Phi(r)+g\left(\Phi^+(r)\Phi(r)\right)\Phi(r)$$

是典型的场算符的非线性方程。

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“慧享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

相互作用玻色子模型与G-P方程

假设粒子凝聚在一个态上，在该态上场算子的平均值为

$$\psi(r,t) = \langle \mathrm{BEC}|\psi(r,t)|\mathrm{BEC}\rangle$$

以后证明发生玻色-爱因斯坦凝聚时，$\psi(r,t)$不为零且为一个很大的量。

分解

$$\Phi(r,t) = \psi(r,t) + \lambda\tilde{\psi}(r,t), \qquad \lambda\text{为微扰参量}$$

则有零阶和一阶的微扰方程。

"版权归中国科学院物理研究所所有" "寇宇学术在线传播专用，未经许可，请勿转载"

相互作用玻色子模型与G-P方程

代入参数化的运动方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)\right]\Phi+g(\Phi^{+}\Phi)\Phi$$

比较方程两边 λ 相同幂次项的“系数”，分别得到

（1）$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)\right]\psi(r,t)+g|\psi|^2\psi(r,t)$

（2）$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(r,t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)\right]\tilde{\psi}+2g|\psi|^2\tilde{\psi}+g\psi^2\tilde{\psi}^{+}$

（1）：Gross-Pitaevskii (GP)方程

量子涨落部分$\tilde{\psi}(r,t)$忽略不计，代表经典运动。

版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有
“蔻享学术”在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

相互作用玻色子模型与G-P方程

为了分离变量，设

$$\psi(r,t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu t/\hbar}\psi(r)$$

有稳态G-P方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) + g|\psi(r)|^2\right]\psi(r) = \mu\psi(r)$$

μ是BEC系统的化学势。

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术仅供传播专用，未经许可，请勿转载！”

相互作用玻色子模型与G-P方程

理想凝聚态的形状：

忽略动量项，稳态方程

$$(V(r)+g|\psi(r)|^2-\mu)\psi(r)=0$$

BEC基态的几率分布

$$|\psi(r)|=\sqrt{(\mu-V(r))/g}$$

托马斯-费米近似

“版权归孙昌璞博士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

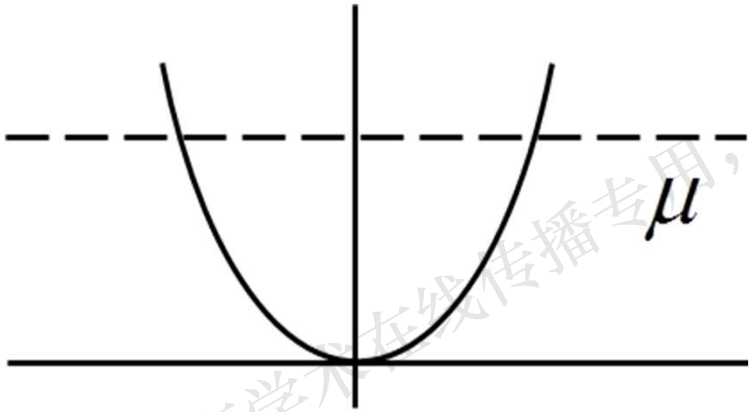
相互作用玻色子模型与G-P方程

束缚势为谐振子势：

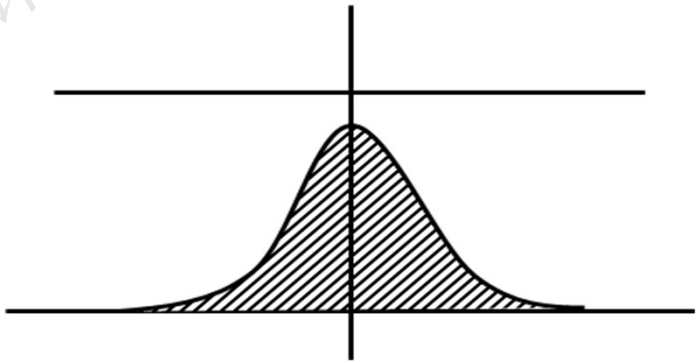
$$V(r)=\frac{1}{2}m\omega^2r^2$$

BEC形状为

$$|\psi(r)|=\sqrt{\left(\mu-\frac{1}{2}m\omega^2r^2\right)/g}$$



囚禁BEC的势阱



在静态近似下BEC的形状

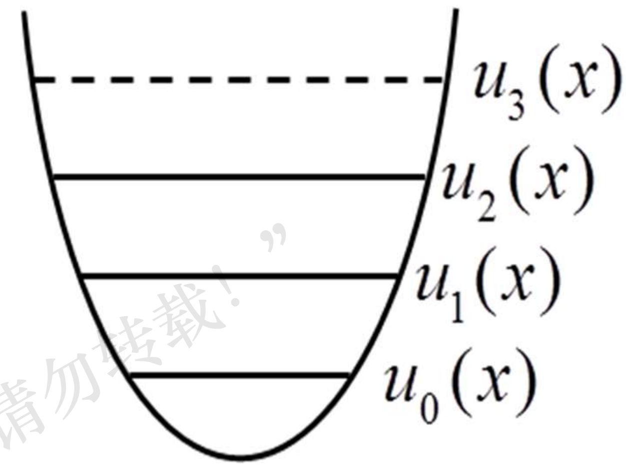
“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

单模近似与位相扩散
(single mode approximation and phase defusion)

无相互作用部分本征方程

$$\left(\frac{p^2}{2m}+V(x)\right)u_\alpha(x)=\epsilon_\alpha u_\alpha(x)$$

定义单粒子本征态 $u_\alpha(x)$ ， $u_0(x)$ 是基态。



谐振子势中单粒子的能级结构

将量子化的场分解：

$$\hat{\psi}=\sum_\alpha a_\alpha u_\alpha e^{-i\omega_\alpha t}$$

$$=a_0u_0e^{-i\omega_0 t}+\sum_{\alpha\neq 0}a_\alpha u_\alpha e^{-i\omega_\alpha t}$$

$$\equiv\vec{\phi}_0(x)+\tilde{\phi}(x)$$

基态　量子涨落

“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

单模近似与位相扩散

忽略掉激发部分

$$\hat{\psi}(x) = \sum_{\alpha \neq 0} a_\alpha u_\alpha e^{-i\epsilon_\alpha t}$$

进行Bogliubov近似

$$H = \int \mathrm{d}^3 r \hat{\psi}^+(r) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V \right] \hat{\psi}(r) + \frac{g}{2} \int \mathrm{d}^3 r \hat{\psi}^+(r) \hat{\psi}^+(r) \psi(r) \psi(r)$$

最低阶有效哈密顿量

$$H = \epsilon_0 a_0^+ a_0 + \hbar \xi a_0^+ a_0^+ a_0 a_0$$

$$\xi = \frac{g}{2} \int d^3 \left| \mu_0 \right|^4, \epsilon_0 \equiv \hbar \omega_0$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

单模近似与位相扩散

如果BEC系统开始时处在相干态上，即

$$|\psi(0)\rangle = |\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} a_0^{+n} |0\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i(\omega_0+\xi n)nt} |n\rangle$$

$$= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\alpha e^{-i\omega_0 t}\right)^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\xi n^2 t} |n\rangle$$

$$\equiv \sum C_n^g(t)|n\rangle$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

单模近似与位相扩散

没有相互作用时，

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\alpha \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\right)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

$$= |\alpha \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\rangle$$

$$\equiv \sum C_n^0(t)|n\rangle$$

代表不扩散的波包。

不扩散的原因：

时间演化因子在每一项中与n呈线性关系，使得每一项相位差不变，

而非线性项导致位相与n^2成正比和正比于n位相差，导致了波包扩散。

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“此资料仅在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

单模近似与位相扩散

扩散问题：

没有相互作用情况时Fock空间的分布为

$$P_n = e^{-|\alpha|^2}\frac{(|\alpha|^2)^n}{n!} = |C_n|^2$$

粒子数的平均值变为

$$\bar{n} = \langle\alpha|a^+a|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} ne^{-|\alpha|^2}\frac{(|\alpha|^2)^n}{n!} = |\alpha|^2\sum_{n=1} e^{-|\alpha|^2}\frac{(|\alpha|^2)^{n-1}}{(n-1)!}$$

$$= |\alpha|^2$$

$$\exp(x) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n/n!$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

单模近似与位相扩散

粒子数涨落

$$\overline{n^2} = \sum_{n=0}^{\infty} n^2 e^{-|\alpha|^2} \frac{(|\alpha|^2)^n}{n!} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-|\alpha|^2} (|\alpha|^2)^n}{(n-1)!} n$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} e^{-|\alpha|^2} \frac{(|\alpha|^2)^n}{(n-1)!} (n-1) + \sum_{n=1}^{\infty} e^{-|\alpha|^2} \frac{(|\alpha|^2)^n}{n-1}$$

$$= |\alpha|^4 \sum_{n=2}^{\infty} e^{-|\alpha|^2} \frac{(|\alpha|^2)^{n-2}}{(n-2)!} + |\alpha|^2$$

$$= |\alpha|^4 + |\alpha|^2$$

粒子数涨落的宽度

$$(\Delta n)^2 = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = |\alpha|^2 = \langle n \rangle$$

不依赖于时间，相互作用并不改变粒子分布性质。

单模近似与位相扩散

存在相互作用时, n粒子Fock态的系数

$$C_n^g(t) = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-in\omega_0 t} e^{-i\xi n^2 t}$$

$\xi \propto g$只提供位相因子, P_n不变意味着粒子数分布方式不变，然而它却可以导致波包的扩散。

假设相互作用很小

$$C_n(t) = C_n^0(t) e^{-i\xi n^2 t} \simeq C_n^0(t) - i\xi n^2 t C_n^0(t)$$

$$|\psi(t)\rangle = |\alpha e^{-i\omega t}\rangle - i\xi t \sum C_{n(t)}^{(0)} n^2 |n\rangle$$

$$= |\alpha e^{-i\omega t}\rangle - i\xi t (a^+ a)^2 \sum C_{n(t)}^{(0)} |n\rangle$$

$$= [1 - i\xi t (a^+ a)^2] |\alpha e^{-i\omega t}\rangle \cong e^{-i\xi t (a^+ a)^2} |\alpha e^{-i\omega t}\rangle$$

“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

单模近似与位相扩散

粒子数平均值和平方的平均值为

$$\langle\psi(t)|a^{+}a|\psi(t)\rangle=\sum_{n}|C_{n}^{2}|n$$

$$\langle\psi(t)|(a^{+}a)^{2}|\psi(t)\rangle=\sum_{n}|C_{n}^{2}|n^{2}$$

C_n与C_n^0仅仅相差一个相位，因此粒子数平均值和平方平均值都不变。

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

单模近似与位相扩散

但是a的平均值由

$$\langle\psi(t)|a|\psi(t)\rangle_{g=0} = \alpha e^{-i\omega t}$$

变为

$$\langle\psi(t)|e^{i\xi t(a^+a)^2} a e^{-i\xi t(a^+a)^2}|\psi(t)\rangle_{g=0}$$

$$= \alpha e^{-i(\omega+\xi)t-|\alpha|^2(1-e^{-2i\xi})}$$

当$\xi t << 1$，

$$\langle\psi(t)|a|\psi(t)\rangle_{g\neq 0} = \alpha e^{-i\omega t}[1 - i\xi t(2|\alpha|^2 + 1)]$$

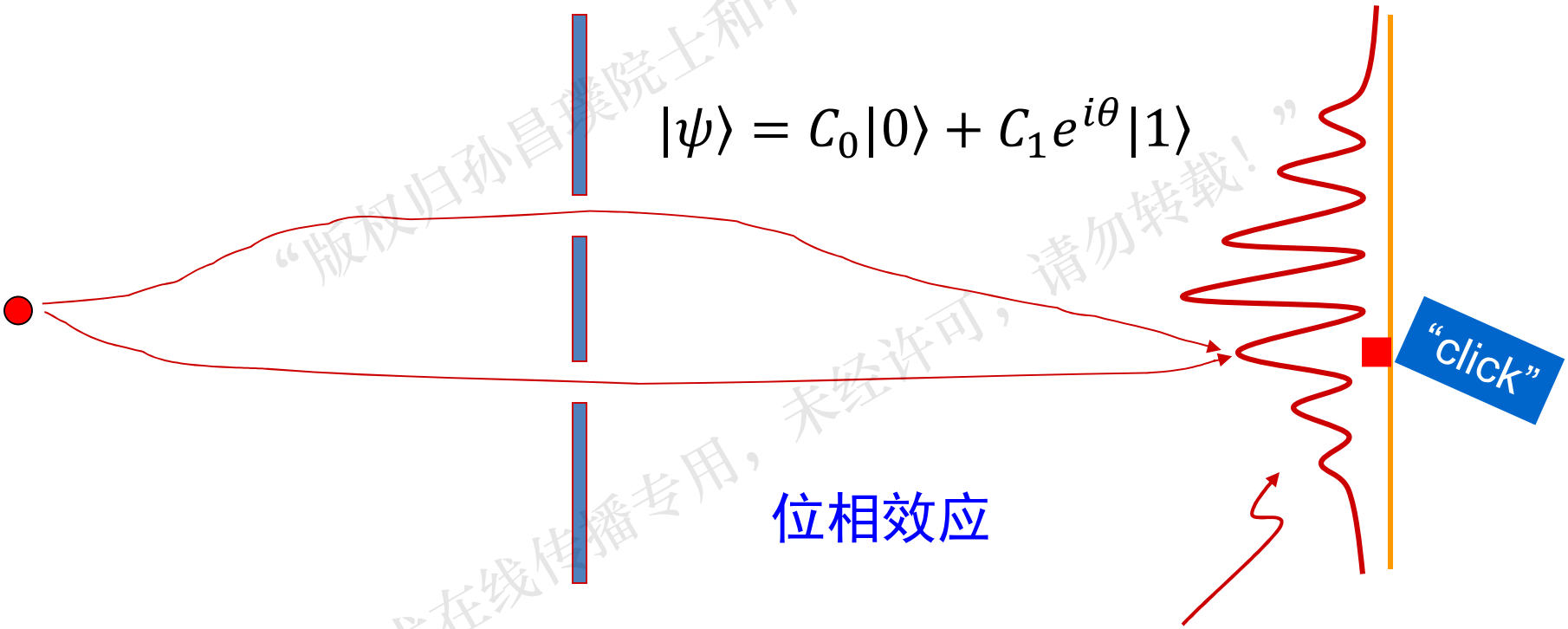
“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

3.7 对称性自发破缺与宏观量子态

“版权所有，吴昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载”

物质波的描述： 量子相干叠加

科学问题：何时有宏观物体态的相干叠加？



“版权归孙昌璞院士和中物院物理所所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

通常宏观物体存在量子效应吗？

崂山道士

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

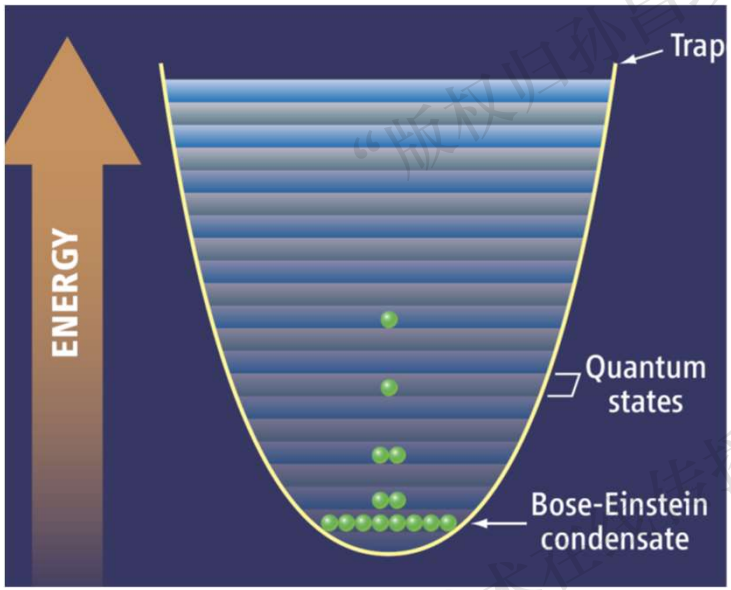
	能量	波长	波段
电子	100ev	0.12 nm	硬X射线
冷原子	170nk	$\sim 10^{-6}$ m	
子弹	10g，300m/s	2×10^{-34} m	
崂山道士	50kg, 30m/s	4×10^{-37} m	远小于其尺度

初步答案：存在，但物质波波长太短、无法被观察

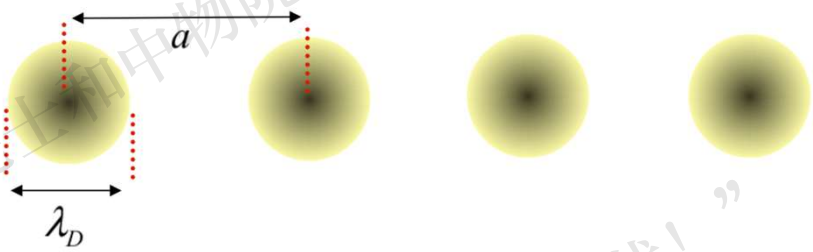
“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载”

增加物质波波长、产生宏观量子态

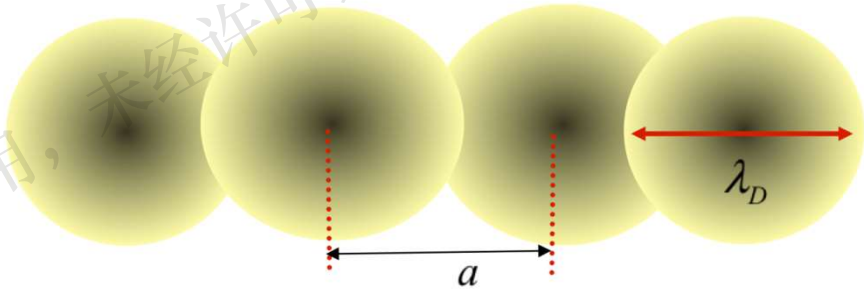
单量子态上的聚集体



通常情况($T > Tc$)



低温临界($T < Tc$)：　$\lambda_D \ll a$

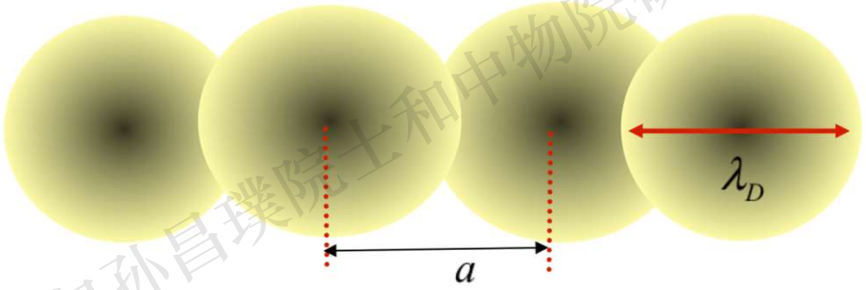


相干重叠、形成整体宏观原子

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“慈享学术”传播专用，未经许可，请勿转载！”

形成BEC的条件

低温临界($T < Tc$)： $\lambda_D \ll a$



热波波长$\lambda_D \equiv \sqrt{\frac{2\pi}{mkT}}$

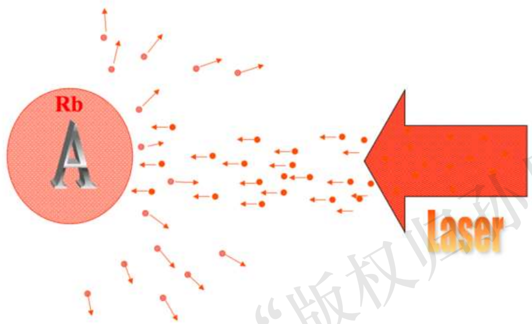
$$\frac{\lambda_D}{a} = \sqrt[3]{2.612} \Leftrightarrow T = T_C = \frac{2\pi}{mka^2(2.612)^{2/3}}$$

玻色-爱因斯坦凝聚=宏观原子

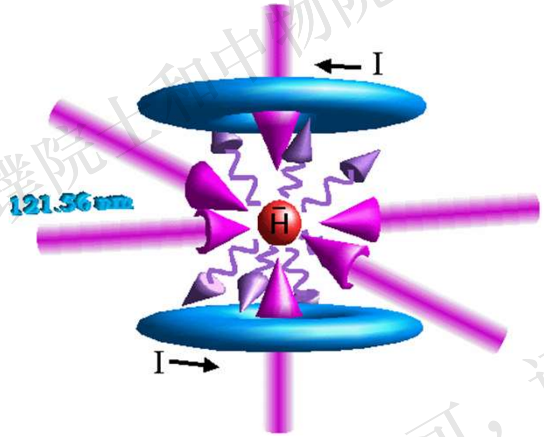
“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播使用，未经许可，请勿转载！”

宏观量子态产生的激光冷却技术

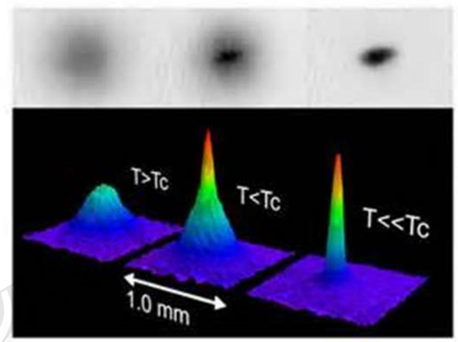
激光冷却原子产生玻色-爱因斯坦凝聚



离子的多普勒激光冷却



激光冷却



David J. Wineland
2012年诺贝尔奖

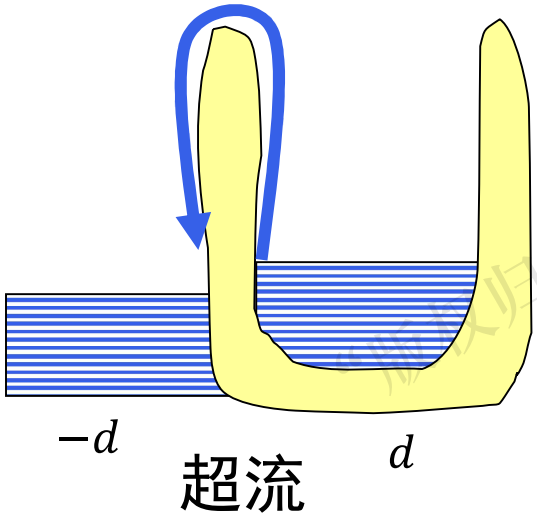
朱棣文，Phillips，
Cohen Tannoudji
1997年诺贝尔奖

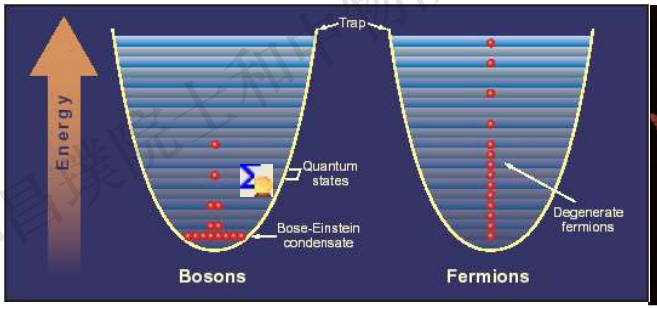
Eric Cornell
Carl Wieman
Wolfgang Ketterle
2001年诺贝尔奖

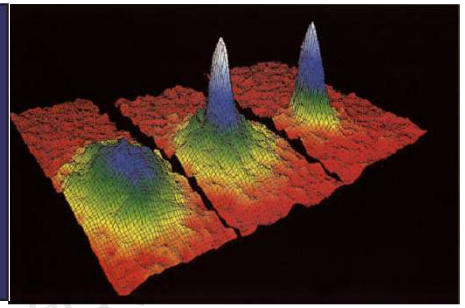
“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿

宏观量子态的描述

在极端条件下存在宏观量子态：超导. 超流







超导　　玻色-爱因斯坦凝聚

怎么刻画宏观量子态？

- 非对角长程序
- 对称性破缺

“蔻享学术在线阅读专用，未经许可，请勿转载”

多粒子系统:平移不变性(I)

平移算子

$$T(x)=\exp[\mathrm{i}px]$$
$$T^{+}(x)HT(x)=H \quad \Longrightarrow \quad [p,H]=0$$

证 明

$$\lim_{\varepsilon\to 0}T(\varepsilon)=\exp[\mathrm{i}p\varepsilon]=1+\mathrm{i}p\varepsilon$$

$$\begin{cases} T^{+}(\varepsilon)HT(\varepsilon)=(1-\mathrm{i}p\varepsilon)H(1+\mathrm{i}p\varepsilon)=H \\ H=p^{2}/2m \end{cases}$$

$$\Rightarrow H-\mathrm{i}[p,H]\varepsilon=H$$

$$\Rightarrow [p,H]=0$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“未经许可，请勿转载！”
“禁止学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

多粒子系统：平移不变性（I）

对于热态

$$\langle A\rangle = \mathrm{tr}\left(\frac{1}{z}\mathrm{e}^{-\beta H}A\right)$$

$$\langle [p,A]\rangle \cong \mathrm{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta H}pA\right) - \mathrm{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta H}Ap\right)$$

$$= \mathrm{tr}\left(p\mathrm{e}^{-\beta H}A\right) - \mathrm{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta H}Ap\right)$$

$\mathrm{tr}(AB) = \mathrm{tr}(BA)$

$$= \mathrm{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta H}Ap\right) - \mathrm{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta H}Ap\right) = 0$$

$$\langle [p,A]\rangle = 0$$

“版权所有，孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

多粒子系统:平移不变性(II)

对心相互作用下

$$V = \ldots + V(x_1 - x_2) + \ldots$$

$$H = \sum \hbar\omega(k) a_k^+ a_k$$

$$\hbar\omega(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$$

a_k^+是动量本征态的产生算子:

$$a_k^+ |0\rangle = |k\rangle$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“慧享学术在线传播，未经许可，请勿转载！”

多粒子系统:平移不变性(II)

$$p = \sum \hbar k a_k^+ a_k$$

根据二次量子化下产生消灭算子的对易性质,

$$\left[p, a_k^+ a_q\right] = \sum \hbar k' \left[a_{k'}^+ a_{k'}, a_k^+ a_q\right] = \hbar(k - q) a_k^+ a_q$$

又有

$$\left\langle \left[p, a_k^+ a_q\right] \right\rangle = 0$$

$$\boxed{\left\langle a_k^+ a_q \right\rangle = \delta_{kq} n_k}$$

"版权属于中国科学院物理研究所所有"
"蔻享学术在线传播专用,未经许可,请勿转载!"

多粒子系统：平移不变性（III）

单粒子约化密度矩阵只有对角元不为零。

$$a_k^+ a_q = \sum_{j=1}^{N} |k(j)\rangle\langle q(j)|, \qquad \langle a_k^+ a_q\rangle = \sum_{j=1}^{N} \langle q(j)|\rho|k(j)\rangle$$

对于N粒子系统

$$\rho = \frac{1}{N}\sum \oplus \rho_j$$

$$\mathrm{tr}(\rho_j) = 1, \mathrm{tr}(\rho) = 1$$

于是有

$$\langle a_k^+ a_q\rangle = \langle q|\rho|k\rangle$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

粒子数守恒：整体U(1)对称性

$$\hat{N} = \sum a_k^+ a_k \, , H = \sum \epsilon_k a_k^+ a_k$$

$$\left[H, \hat{N}\right] = 0 \Longrightarrow e^{i\hat{N}\theta} H e^{-i\hat{N}\theta} = H$$

定理：对于粒子数守恒系统，场算子的期望值为零

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikx} a_k \, , \qquad \langle \psi(x) \rangle = 0$$

注：这个定理在热力学极限下要重新考虑

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“慧享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

证 明

$$e^{iN\theta}ae^{-iN\theta} = e^{-i\theta}a$$

$$\begin{aligned}\langle a_k\rangle &\cong \mathrm{tr}\left(e^{-\beta H}a_k\right)\\ &= \mathrm{tr}\left(e^{-iN\theta}e^{-\beta H}a_k e^{iN\theta}\right)\\ &= \mathrm{tr}\left(e^{-\beta H}e^{-iN\theta}a_k e^{iN\theta}\right)\\ &= \langle a_k\rangle e^{-i\theta}\end{aligned}$$

对于任何θ

$$\left(1-e^{-i\theta}\right)\langle a_k\rangle = 0 \Rightarrow \langle a_k\rangle = 0$$

一般结论：具有平移不变性的粒子数守恒系统

$$\left\langle a_k^{+}a_q\right\rangle = \delta_{kq}n_k$$
$$\langle\psi(x)\rangle = 0$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

玻色-爱因斯坦凝聚(I)

玻色子系统 $$n_{\vec{q}} = \frac{1}{e^{\left(\varepsilon_{\vec{q}}-\mu\right)/k_BT} - 1}$$

高温条件下($T >> T_c$): $$n_{\vec{q}} \to e^{\mu/k_BT} e^{-\varepsilon_{\vec{q}}/k_BT}$$

低温条件下($T << T_c$):

$$\mu \to 0, \qquad N = \sum_{\vec{q}} n_{\vec{q}} = \frac{4\pi V g\sqrt{2}m^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}d\varepsilon}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT} - 1}$$

$$\boxed{\rho_c\lambda_D^3 = \left(\frac{N}{V}\right)_c \lambda_D^3 = 2.612; \qquad \lambda_D = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}}}$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

非对角长程序[ODLRO]（I）

C. N. Yang, RMP, 1962

一阶相干函数=单粒子约化密度矩阵

$$G^{(1)}(x,y)=\rho(x,y)=\langle\psi^{+}(x)\psi(y)\rangle$$

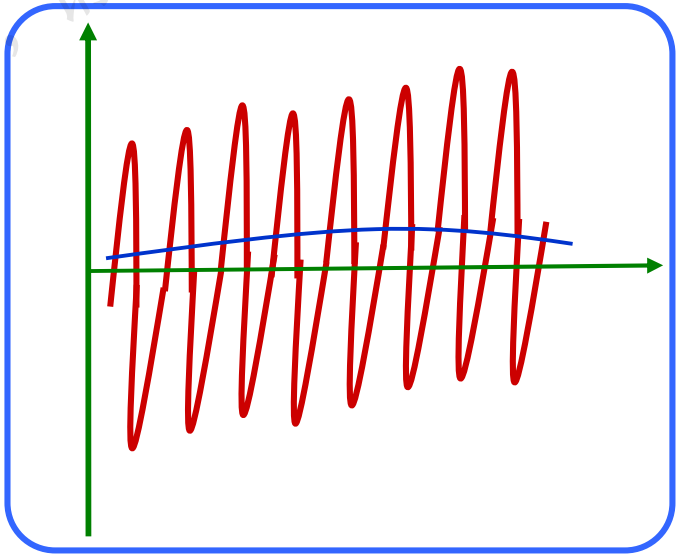
$$=\sum_{k}\langle\hat{n}_k\rangle\frac{e^{ik(x-y)}}{V}$$

$$=\int n_k e^{ik(x-y)}dk \xrightarrow{Boson} 0$$

$$r=|x-y|\to\infty$$

$$\int f(z)e^{iqz}dz \xrightarrow{q\to\infty} 0$$

$$< a_k^{+}a_q >= \delta_{kq}n_k$$



没有玻色-爱因斯坦凝聚，就没有ODLRO

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术”在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

非对角长程序[ODLRO]（I）

一阶相干函数=单粒子约化密度矩阵

$$\rho(x,y)=\frac{n_0}{V}+\int n_k e^{ik(x-y)}dk \to \frac{n_0}{V}+\frac{mkT}{2\hbar^2 r}\exp[-\frac{r}{\lambda_D}]$$

有玻色-爱因斯坦凝聚，就有ODLRO

$$r=|x-y|\to\infty$$

$$\rho(x,y)\to\frac{n_0}{V}$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播之用，未经许可，请勿转载！”

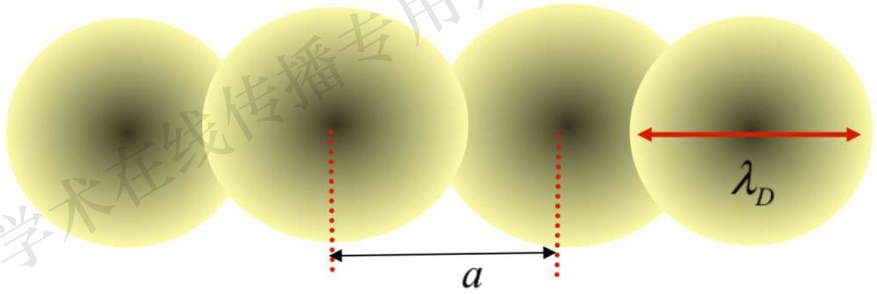
非对角长程序[ODLRO]（I）

玻色-爱因斯坦凝聚时的关联长度是热波波长

$$\lambda_D = \frac{\hbar}{\sqrt{2mkT}}$$

从直观的物理现象看，温度变低时热波波长变大。

热波波长与原子间距可比时，多原子系统就形成了相干的整体——BEC（或称宏观原子）



“蔻享学术在线传播专用，未经许可，谢绝转载。”

序参量（order parameters）

Penrose-Onsager判据

$$\rho(x,y) \to \frac{n_0}{V} = \phi^*(x)\phi(y)$$

与Bogoliubov近似等价，

$$\langle \psi^+(x)\psi(y)\rangle \to \phi^*(x)\phi(y)$$

1951

$\phi(x)\phi(y)$是密度算子因子化的函数

1947

$$\langle \psi^+(x)\rangle = \phi(x) \neq 0$$

“版权所有 孙昌璞院士和物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

序参量（order parameters）

对BEC系统的场算子，分解出对应于基态的a_0模

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} u_0(x) a_0 + \sum_{k\neq 0} [\quad]$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} u_0(x) a_0 + \sum_{k\neq 0} [\quad]$$

$$a_0 \to \sqrt{N_0} \quad \psi \to \phi = \frac{1}{\sqrt{V}} u_0(x)$$

GP方程 1961

“版权归孙昌璞院士和物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

Bogoliubov近似

BEC基态及其与外界的相互作用

$$H_0 = \ldots a_0 F^+ + \text{h.c.} + \ldots$$

$$\left.\begin{array}{l} i\partial_t|\varphi\rangle = H_0|\varphi\rangle, \\ |\varphi(0)\rangle = |\alpha\rangle(\text{相干态}) \end{array}\right\} \Longrightarrow \left\{\begin{array}{l} i\partial_t|\psi\rangle = H_B|\psi\rangle, \\ |\psi(0)\rangle = |0\rangle(\text{真空态}) \end{array}\right.$$

当α值较大时，

$$H_B \to \alpha F^+ + \alpha^* F + \ldots$$

就是Bogoliubov近似

$$a_0 \to \sqrt{N_0} \qquad \psi \to \phi = \frac{1}{\sqrt{V}} u_0(x)$$

“版权所有，孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线”播专用，未经许可，请勿转载！

“证明”Bogoliubov近似

$$D(\alpha) = \exp(\alpha a_0^+ - \alpha^* a_0), \qquad D^{-1}(\alpha) a_0 D(\alpha) = a_0 + \alpha$$

$$\begin{aligned} H_B &= D^{-1}(\alpha) H_0 D(\alpha) \\ &= (a_0 F^+ + a_0^+ F) + (\alpha F^+ + \alpha^* F), \\ &= H_0 + \alpha F^+ + \alpha^* F, \end{aligned}$$

当α值较大时，可以近似地得到低能有效哈密顿量

$$H_B \approx \alpha F^+ + \alpha^* F + \ldots$$

Bogoliubov近似可以正确描述BEC基态及其与外界的相互作用

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“未经许可，请勿转载。”

对称性破缺与热力学极限

$U(1)$对称性破缺

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k \to H = H_0 + g\sqrt{V}(a_0^+ + a_0)$$

$g\sqrt{V} \to$ 常数，称为范霍夫极限，类似于热力学极限

$$\langle a_0 \rangle = \lim_{\substack{g\to 0 \\ V\to\infty}} \lim_{N\to\infty} \langle a_0 \rangle_H = \sqrt{N_0} \neq 0$$

“版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有”
“请勿转载！”
“慧享学术在线传播专用，未经许可”

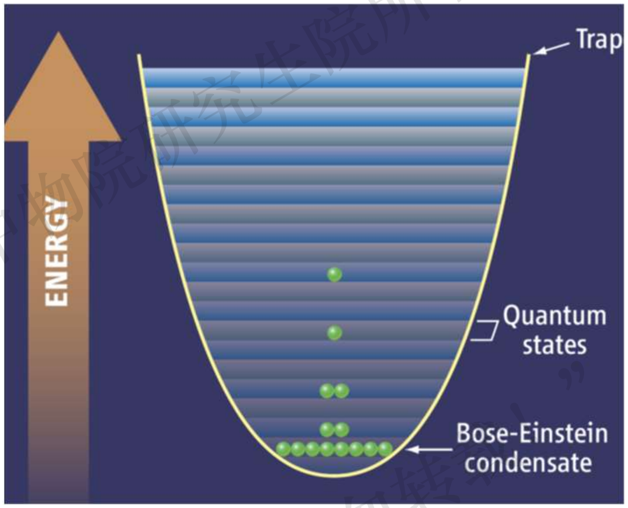
多者异也

物理上，我们认为非零序参量出现是对称性破缺的结果。这种由序参量描述的对称性破缺产生宏观有序的量子态现象被叫做演生现象(emergence)，它代表了与深层次物质结构相对的另一类普适的自然界规律。 P. W. Anderson说， “More is different”，这就是谈多体系统的宏观有序的演生现象。

“版权归上昌璞院士和中国科学院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

一个关键科学问题

1. 平移不变性
2. $U(1)$对称性破缺
3. 热力学极限



没有平移不变性，阱中BEC怎样严格定义？

Chau, Yang, Yu, 1996,

“版权归朴院士和中物院研究生院所有”
“蔻享学术在线传播已经许可，请勿转载！”