

目录

第八章 全同性原理与多体量子力学	2
8.1 *时间演化算符与路径积分	4
8.1.1 坐标表象中的时间演化算符	4
8.1.2 单粒子路径积分	7
8.2 *路径的拓扑类和编织	11
8.3 *全同粒子统计	17
8.3.1 全同粒子路径积分	17
8.3.2 2 + 1维以及3 + 1维的讨论	18
8.3.3 作为规范对称性的置换对称性	24
8.4 *自旋统计定理	30
8.5 玻色子和费米子	33
8.5.1 多体希尔伯特空间	34
8.5.2 置换对称性	36
8.5.3 应用举例	43
8.6 *产生湮灭算符与全同粒子量子力学	46
8.7 *附录: 单粒子路径积分公式推导	53

第八章 全同性原理与多体量子力学

陈童

通常教科书在处理全同性原理时作了一些默认的假定：第一，全同粒子体系的任何物理状态在相差一个相因子的意义上由唯一一个数学上的态矢量来描述。第二，全同粒子体系满足置换对称性。第三，在全同粒子置换下所有物理可观测量都保持不变。这三条假设意味着，全同粒子的置换对称性其实是一种特殊的规范对称性(而不是通常的对称性)，或者文小刚老师所谓的规范结构。而要从逻辑上解释这种规范对称性的来源，最自然的办法是使用路径积分。

然而，令人吃惊的是，路径积分的推导表明，在 $2+1$ 维时空，全同粒子的置换对称性可以被推广成编织操作。当然，这时候它就不再是一个对称性概念了，但是编织操作允许 $2+1$ 维时空出现既非玻色子又非费米子的任意子。理论研究表明，有一些任意子可以帮助我们实现通用量子计算机，从而在最近一些年引起了人们广泛的兴趣。而且任意子已经不再是一个理论构想，最近的实验已经在二维系统中观测到了任意子。

本章除了讨论 $2+1$ 维的任意子统计和 $3+1$ 的玻色-费米统计之外，我们还将一般性地解释自旋-统计定理。而且我们也会讨论在理论上如何更方便地处理多个全同玻色子的体系或者多个全同费米子的体系的量子力学。但是，本章的很多讨论在理论上偏深，对于初学者来说，我们建议仅仅阅读本章的(8.5)节玻色子和费米子，等到日后想要更深入地理解全同性原理和多体量子力学时再阅读其它各节。

有一个哲学观点说，世界上没有两件完全一样的事物，莱布尼茨将这个观点简化为，“世界上没有完全相同的两片树叶”。但在量子世界里，这个观点是错的！量子客体可以完全相同，比方说，世界上所有的电子都完全相同，世界上所有的光子也完全相同。更具体一点说，假设有两个电子，分别在 A 、 B 两地，那么除非你一直持续不断地追踪测量这两个电子的运动轨迹，否则就无从区分 A 、 B 两地的电子分别是哪一个。但是，由于位置和动量的不确定关系，在量子力学中，精确追踪电子的运动轨迹实际上是不可能的。因此，从根本上来说，人们无法区分两个电子中哪个是哪个。这一章我们要学习的就是这种量子全同性，以及相应的多体量子力学。

比方说，如图(8.1)所示，(1)、(2)两个全同粒子分别从左右两侧入射，相互碰撞后其中一个粒子进入探测器 D ，但是探测器探测到的有可能是粒子(1)(如图(8.1)(a))，也有可能是粒子(2)(如图(8.1)(b))，由于(1)、(2)两个粒子全同，(a)、(b)这两种可能性无法分辨，最终探测器 D 探测到一个粒子的概率幅应该是(a)、(b)两种情形的概率幅的叠加。然而两个概率幅的

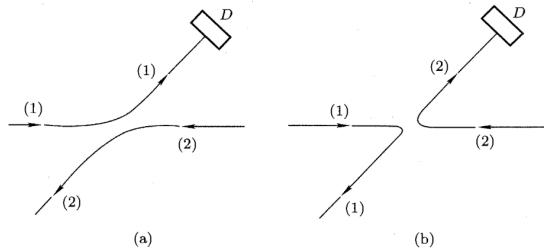


图 8.1: 从左右两侧入射的两个全同粒子碰撞以后，探测器 D 探测到粒子的概率幅应该是(a)和(b)两种情况的叠加。

线性叠加有无穷多种可能性，最终计算出来的概率通常都不相同，对于量子全同粒子我们该使用哪种叠加方式呢？这就是全同性原理所要解决的问题。

另一方面，虽然有时候研究单个微观粒子的量子力学就能得到关于世界的一些重要规律。但是，从根本上说，决定我们这个世界的绝非单个粒子，甚至也不是几个粒子，而是涉及到大量的全同粒子。比方说，分数量子霍尔效应就涉及到大量电子的相互作用，如果我们仅仅研究单个电子在磁场中的规律，那就无法解释分数量子霍尔效应。因此我们也有必有研究如何才能更方便地处理多个全同粒子的体系的量子力学。

8.1 *时间演化算符与路径积分

8.1.1 坐标表象中的时间演化算符

在前面的第二章中我们已经知道，一个量子系统的动力学演化规律完全由时间演化算符 $U(t_f, t_i)$ 决定。 $U(t_f, t_i)$ 是一个幺正算符，当将它作用在 t_i 时刻的初态 $|\psi(t_i)\rangle$ 上，我们就可以得到系统在 t_f 时刻的量子态 $|\psi(t_f)\rangle$ ，即 $|\psi(t_f)\rangle = U(t_f, t_i)|\psi(t_i)\rangle$ 。很显然， $U(t, t) = 1$ ，并且我们也知道 $U(t_f, t_i) = \exp(-iH(t_f - t_i)/\hbar)$ 。一般地，时间演化算符满足如下基本方程

$$U(t_f, t_i) = U(t_f, t)U(t, t_i), \quad (8.1)$$

这个方程的含义非常简单，即，先将系统从 t_i 时刻演化到某个中间 t 时刻，接着再从 t 时刻演化到 t_f 时刻，其效果就相当于将系统从 t_i 时刻演化到 t_f 时刻。

所有量子系统的时间演化算符都必须满足方程(8.1)，同时还得是一个幺正算符。在理论上，给出一个量子系统就是要给出它的时间演化算符表达式，而幺正性和方程(8.1)就是对这些时间演化算符的基本限制。换言之，只有满足方程(8.1)的时间演化算符才能从理论上定义一个量子系统。

有哪些可能的时间演化算符可以满足方程(8.1)呢？ $U(t_f, t_i) = \exp(-iH(t_f - t_i)/\hbar)$ 显然是一个回答，这个回答是用哈密顿量来给出的，从第二章中我们已经知道，这个回答可以方便地给出薛定谔方程，而且在这一回答中，由于哈密顿算符是厄密算符，所以相应的时间演化算符必然是幺正的¹。但实际上，人们也可以在坐标表象中利用拉格朗日量来回答这个问题，这就是所谓的量子力学的路径积分表述。当然，对于路径积分给出来的坐标表象时间演化概率幅，我们需要额外证明其幺正性。对于单粒子情形，在本章附录中我们通过直接从哈密顿量形式的时间演化算符(它必然幺正)推导出路径积分形式的时间演化公式完成了这一证明。

具体来说，为了得出路径积分形式的时间演化公式，我们首先要取坐标表象(更一般的，也就是取量子系统基本动力学变量的本征态表象)。对于一个 N 个全同粒子的体系，我们以有序坐标组 $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\}$ 表示这 N 个

¹在第二章中，我们实际上是反过来利用时间演化算符的幺正性一般性地证明哈密顿算符是厄密算符。

粒子的坐标，并将这一组坐标笼统地简记为 $\{\mathbf{x}\}$ ，称之为系统的一个位形²。当然，一个粒子的动力学变量除了有坐标之外，还可能携带有自旋等等内部自由度，为了符号简洁起见，我们将标记粒子局域内部自由度的量子数也包括在坐标标记号 \mathbf{x} 里面，比方说，对于一个自旋量子数为 m_s 的粒子，我们的 \mathbf{x} 其实是代表 (\mathbf{x}, m_s) 这一对变量。推而广之，我们这里的 \mathbf{x} 实际上刻画了粒子所携带的所有局域信息，这些局域信息是和粒子一起运动的。总之，系统的坐标本征态可以记为 $|\{\mathbf{x}\}\rangle$ ，它满足如下完备性关系

$$\sum_{\{\mathbf{x}\}} |\{\mathbf{x}\}\rangle \langle \{\mathbf{x}\}| = 1. \quad (8.2)$$

式中的求和号 $\sum_{\{\mathbf{x}\}}$ 代表对每一个粒子的坐标进行全空间积分，同时对所有离散的局域内部自由度量子数求和。

注意，我们会在两个略有区别的意义上使用自由度这个词，一是用来指系统的动力学变量，另一方面我们也会将粒子本身称作自由度，当我们在后一种意义上使用自由度这个词时，我们通常的说法是称作物理自由度。

局域性与非局域性

坐标表象的好处之一是，我们很容易利用它来定义局域性(Locality)的概念。物理学中关于局域性有各种不同的定义，为了帮助读者直观理解局域性，我们这里直接将局域定义成时空局部或者说时空邻域³。因此所谓的局域物理自由度，就是坐标在同一个时空邻域内的那些物理自由度，比如 A 点附近的一个点粒子就是 A 点附近的一个局域物理自由度。如果 A 点附近有好几个靠得很近的粒子，那么它们都属于 A 附近的局域物理自由度。当然，有时候我们也直接将点粒子本身称作局域物理自由度，因为在坐标表象中，每个时刻点粒子都只能待在一个局域时空点附近。

另外，我们还要引入局域信息和非局域信息的概念。所谓的局域信息，就是单独一个时空邻域内的局域物理自由度所携带的信息。但是，前面第二章中我们学习过量子纠缠，我们知道，两个不同空间点的粒子可以通过纠缠处于一个整体的纠缠态，这时候每一个粒子本身都不携带这个纠缠态的信息，两个不同空间点的粒子作为一个整体才携带了纠缠态的信息。

²这只不过是一种方便的说法，由于粒子全同性，真正的位形应该是 $\{\mathbf{x}\}$ 在所有可能置换下的等价类。

³考虑到相对论的话，时空邻域的概念其实需要进一步精确化。

这种由类空相间的两个不同时空邻域内的局域物理自由度作为一个整体携带的纠缠态信息就是一种非局域信息。类空相间当然是一个比较精确的说法，它即是指这样的两个邻域之间无法传递信息。在非相对论量子力学中，由于光速非常大，这时候与类空相间对应的概念其实就是给定时刻，两个距离比较远的空间邻域。两体纠缠能够产生非局域信息，多体纠缠当然也能产生非局域信息。当然，如果我们将处于纠缠态的一对粒子放到一起，使得它们处于同一个时空邻域内，那这时候这个纠缠态的信息就变成了局域信息，这时候我们就可以通过对邻域内的这一对电子进行联合测量来提取这个局域信息。注意，如果纠缠的这一对粒子离得很远，类空相间，那它们的纠缠态信息就是非局域信息，这时候没有仪器可以实现对两者的联合测量，这其实是一种更深层次的局域性原理。

总之，对量子纠缠的学习告诉我们，即使是在局域的坐标表象中，量子系统依然可能产生非局域信息。当然，量子纠缠的非局域信息是将多个局域物理自由度纠缠起来产生的，比方说你让一对电子处于某个贝尔态中，然后将这两个电子分别局域在不相邻近的A、B两个不同点，这时候，这个贝尔态的量子信息当然是非局域的，但作为一个整体携带这种非局域信息的两个电子各自都是局域的。正因为如此，在最基本的层次上，量子纠缠态的信息和局域信息并不完全相互独立，这种不相互独立就是可以利用量子纠缠来进行量子隐形传态将局域信息从A地隐形传送到B地的关键。

但是，可以设想我们考察的不是一个量子系统最基本的物理自由度，而是系统的有效物理自由度，比方说在分数量子霍尔效应中我们不考察最基本的电子，而考察系统的任意子激发。这时候系统的某些非局域信息就完全有可能和这些有效物理自由度的局域信息相互独立。

回到我们前面研究的N个全同粒子的系统。上面的分析告诉我们，如果我们考察的这N个全同粒子是有效物理自由度的话，那就有可能还有一些与局域信息 $\{\mathbf{x}\}$ 完全独立的非局域信息。我们用一个独立的量子数n来区分这些非局域信息， $n = 1, 2, 3 \dots M$ 。如此一来，我们的坐标表象本征态就应该进一步推广成 $|\{\mathbf{x}\}, n\rangle$ ，而原来的完备性关系(8.2)就应该推广成，

$$\sum_{\{\mathbf{x}\}, n} |\{\mathbf{x}\}, n\rangle \langle \{\mathbf{x}\}, n| = 1. \quad (8.3)$$

在这个坐标表象下，我们可以把时间演化算符 $U(t_b, t_a)$ 表示成

$$\langle \{\mathbf{x}\}_b, m | U(t_b, t_a) | \{\mathbf{x}\}_a, n \rangle = \langle \{\mathbf{x}\}_b, m, t_b | \{\mathbf{x}\}_a, n, t_a \rangle. \quad (8.4)$$

等式右边 $|\{\mathbf{x}\}, n, t\rangle$ 这样的记号表示 $|\{\mathbf{x}\}, n, t\rangle = \exp(iHt/\hbar)|\{\mathbf{x}\}, n\rangle$, 它其实是海森堡绘景中坐标算符的本征态(海森堡绘景中坐标算符要随着时间演化, 因此其本征态也依赖于时间)⁴。通过利用完备性关系(8.3), 现在我们就可以把时间演化算符的基本方程(8.1)重新表示成

$$\begin{aligned} & \langle \{\mathbf{x}\}_f, m | U(t_f, t_i) | \{\mathbf{x}\}_i, n \rangle \\ = & \sum_{\{\mathbf{x}\}_b, k} \langle \{\mathbf{x}\}_f, m | U(t_f, t_b) | \{\mathbf{x}\}_b, k \rangle \langle \{\mathbf{x}\}_b, k | U(t_b, t_i) | \{\mathbf{x}\}_i, n \rangle. \end{aligned} \quad (8.5)$$

或者也可以用等式(8.4)右边的记号重写为⁵

$$\langle \{\mathbf{x}\}_f, m, t_f | \{\mathbf{x}\}_i, n, t_i \rangle = \sum_{\{\mathbf{x}\}_b, k} \langle \{\mathbf{x}\}_f, m, t_f | \{\mathbf{x}\}_b, k, t_b \rangle \langle \{\mathbf{x}\}_b, k, t_b | \{\mathbf{x}\}_i, n, t_i \rangle \quad (8.6)$$

只要知道了 $\langle \{\mathbf{x}\}_f, m, t_f | \{\mathbf{x}\}_i, n, t_i \rangle$, 我们就很容易求出任何波函数的时间演化。这是因为, 根据 $|\psi(t_f)\rangle = U(t_f, t_i)|\psi(t_i)\rangle$, 我们可以得到

$$\begin{aligned} \langle \{\mathbf{x}\}_f, m | \psi(t_f) \rangle &= \sum_{\{\mathbf{x}\}_i, n} \langle \{\mathbf{x}\}_f, m | U(t_f, t_i) | \{\mathbf{x}\}_i, n \rangle \langle \{\mathbf{x}\}_i, n | \psi(t_i) \rangle \\ &= \sum_{\{\mathbf{x}\}_i, n} \langle \{\mathbf{x}\}_f, m, t_f | \{\mathbf{x}\}_i, n, t_i \rangle \langle \{\mathbf{x}\}_i, n | \psi(t_i) \rangle. \end{aligned} \quad (8.7)$$

式中 $\langle \{\mathbf{x}\}, n | \psi(t) \rangle = \psi(\{\mathbf{x}\}, n, t)$ 就是系统的波函数, 而上面这个方程给出的就是波函数的时间演化规律。

8.1.2 单粒子路径积分

路径积分不是直接告诉我们量子态如何随时间演化, 而是利用作用量给出时间演化算符 $U(t_b, t_a)$ 在坐标表象下的矩阵元 $\langle \{\mathbf{x}\}_b, m, t_b | \{\mathbf{x}\}_a, n, t_a \rangle$ 的计算公式。下面我们先就单粒子情形阐述费曼得出路径积分公式的基本思想, 然后给出单粒子情形的费曼路径积分公式, 并解释这个公式的由来,

⁴如果用我们在第二章第4节《补充材料: 海森堡是怎么想到矩阵相乘的》的语言来说, 那么 $\{\{\mathbf{x}\}, n, t\}$ 就代表系统 t 时刻的一组特定的可确定区分可能性完备集, 而等式(8.4)右边的 $\langle \{\mathbf{x}\}_b, m, t_b | \{\mathbf{x}\}_a, n, t_a \rangle$ 其实就是 t_a 时刻到 t_b 时刻的一个跃迁幅。因此, 第二章第4节中跃迁幅的概念其实就是时间演化算符的矩阵表示。

⁵这个方程其实就是在第二章第4节《补充材料: 海森堡是怎么想到矩阵相乘的》中通过1的自身等于1 以及海森堡和费曼的跃迁元乘法规则所导出来的跃迁幅的基本性质。

最后再具体验证它满足基本方程(8.6)。至于对路径积分幺正性的证明，我们放在附录中进行。

如果整个系统只有一个粒子，那所有的信息都只能由这个粒子携带，从而都必定是局域信息，因此标记非局域信息的量子数这时候实际上不存在。这时候坐标表象本征态可以简单记为 $|\mathbf{x}\rangle$ ， \mathbf{x} 就是这个粒子的坐标(包括一些可能的局域内部自由度量子数)。而时间演化算符在坐标表象下的矩阵元就是 $\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle$ ，它描述的就是， t_a 时刻粒子从位置 \mathbf{x}_a 出发，在 t_b 时刻演化到 \mathbf{x}_b 位置的概率幅。根据(8.6)， $\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle$ 满足如下基本方程

$$\langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle = \sum_{\mathbf{x}_b} \langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_b, t_b \rangle \langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_i, t_i \rangle. \quad (8.8)$$

如果这个粒子是一个经典粒子，我们知道它将遵循最小作用量原理，在 t_a 时刻从 \mathbf{x}_a 出发， t_b 时刻到达 \mathbf{x}_b 位置的所有可能路径中，它将走使得作用量泛函 $S[\mathbf{x}]$ 取极值的那条路径，也就是经典路径。注意，这里出现了作用量这个量，这其实是一个提示，它告诉我们当我们在量子力学层次上计算 $\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle$ 时，作用量 S 也可能很重要。最早注意到这个提示的是狄拉克，但直到费曼才将这个提示发展成一个关于量子力学的自洽理论，也就是路径积分。费曼注意到，对于一个量子粒子而言，由于其位置和动量不可同时确定，所以在量子的层次上，粒子的运动路径任何情况下都无法确定(因为确定了一条运动路径就意味着位置和速度，或者说动量，的同时确定)。海森堡同样知道这一点，但海森堡的看法是，这说明粒子的运动路径不可观测，这个概念应该从量子力学理论中抛弃掉。海森堡当然并没有错，在量子力学中，运动路径的确不再是一种可观测的物理实在，在这个意义上，确定的路径确实是不存在的！

但是费曼认为，作为一个发展理论的概念，路径可以被保留。这就有点像电动力学中，矢量势也不可观测，但矢量势的概念对于电动力学理论依然很重要。费曼认识到量子力学的不确定性来自于叠加，如果电子自旋的 z 分量无法确定，那就意味着电子处在叠加态，需要将电子的自旋 $1/2$ 态和自旋 $-1/2$ 态叠加起来。类似的，费曼认为，粒子运动路径的无法确定意味着有许多运动路径都对概率幅 $\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle$ 有贡献，而我们需要把这些不同路径的贡献叠加起来。这是因为，如果只有一条运动路径对 $\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle$ 有贡献，就像经典力学里面的最小作用量路径一样，那粒子的运动路径就确定了，而这就和量子力学矛盾了。不过，与电子自旋叠加态的不同之处在于，电子的自旋 $1/2$ 态和 $-1/2$ 态本身都可观测，所以我们

可以讨论这两个自旋态本身的叠加。但是，任何一条确定路径本身在物理观测上都不存在，所以当然也并没有不同路径本身相叠加的概念，我们叠加的是按不同路径计算出来的对 $\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle$ 这个量的贡献。

进一步，费曼认为，如果我们完全不限制粒子的演化过程，那它的运动路径就会具有最大的量子不确定性，这时候所有可能路径都会对 $\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle$ 有贡献，相应的我们就应该将所有这些贡献都加起来。

每一条运动路径对 $\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle$ 的贡献是多少呢？费曼在狄拉克的工作基础上提出，贡献是 $e^{iS[\mathbf{x}]/\hbar}$ ， $S[\mathbf{x}]$ 就表示这条路径的作用量。因此费曼提出他的路径积分公式

$$\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle = \sum_{\mathbf{x}(t)} e^{i \frac{S[\mathbf{x}(t)]}{\hbar}}. \quad (8.9)$$

式中的求和是对所有可能路径求和， $\mathbf{x}(t)$ 表示一条 t_a 时刻起于 \mathbf{x}_a ， t_b 时刻到达 \mathbf{x}_b 的运动路径， $S[\mathbf{x}(t)]$ 表示这条路径的作用量，它是拉格朗日量的时间积分

$$S[\mathbf{x}(t)] = \int_{t_a}^{t_b} dt L(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), t). \quad (8.10)$$

至于如何对所有路径进行求和，这其实是一个重要的数学问题，我们将会在本章附录中进一步讨论。

为什么每条路径的贡献是 $e^{iS[\mathbf{x}]/\hbar}$ 呢？大致的解释如下：首先，为了使得路径求和最终计算出来的结果 $\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle$ 满足基本方程(8.8)，每条路径的贡献就必须要取 $e^{iS/\hbar}$ 这样的指数形式，而且指数上的 S 应该是某个量沿着路径的时间积分。进一步，为了满足么正性，这个 S 只能是相应路径的作用量，它是拉格朗日量的时间积分。关于 S 为什么要是作用量，在本章的附录中我们将会看得很清楚，下面我们来具体验证(8.9)满足方程(8.8)。

为了表达清晰，我们引入一些记号，我们将一条 t_a 时刻从 \mathbf{x}_a 发出， t_b 时刻到达 \mathbf{x}_b 的路径 $\mathbf{x}(t)$ 记为， $\mathbf{x}(t) : a \rightarrow b$ ，称之为 $\{t_a, \mathbf{x}_a\} \rightarrow \{t_b, \mathbf{x}_b\}$ 路径，相应的作用量记为 $S_{a \rightarrow b}[\mathbf{x}(t)]$ 。则根据费曼的路径积分公式(8.9)，我们有

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{x}_b} \langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_b, t_b \rangle \langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_i, t_i \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{x}_b} \left(\sum_{\mathbf{x}(t):b \rightarrow f} e^{i \frac{S_{b \rightarrow f}[\mathbf{x}(t)]}{\hbar}} \right) \left(\sum_{\mathbf{x}(t):i \rightarrow b} e^{i \frac{S_{i \rightarrow b}[\mathbf{x}(t)]}{\hbar}} \right) \\ &= \sum_{\mathbf{x}_b} \sum_{\mathbf{x}(t):i \rightarrow b \rightarrow f} e^{i (S_{i \rightarrow b}[\mathbf{x}(t)] + S_{b \rightarrow f}[\mathbf{x}(t)]) / \hbar}. \end{aligned} \quad (8.11)$$

式中求和下标 $\mathbf{x}(t) : i \rightarrow b \rightarrow f$ 表示由一条 $\{t_i, \mathbf{x}_i\} \rightarrow \{t_b, \mathbf{x}_b\}$ 路径结合一条 $\{t_b, \mathbf{x}_b\} \rightarrow \{t_f, \mathbf{x}_f\}$ 路径所形成的路径，它其实是一条 $\{t_i, \mathbf{x}_i\} \rightarrow \{t_f, \mathbf{x}_f\}$ 路径，只不过这条路径中间的 $\{t_b, \mathbf{x}_b\}$ 点被固定了，式(8.11)中的求和号 $\sum_{\mathbf{x}(t):i \rightarrow b \rightarrow f}$ 就是表示对所有这种路径求和。但是，当我们如式(8.11)中那样进一步对所有 \mathbf{x}_b 求和时，那这个中间 $\{t_b, \mathbf{x}_b\}$ 点就不再是固定的了，因此实际上(8.11)中的两个求和号 $\sum_{\mathbf{x}_b} \sum_{\mathbf{x}(t):i \rightarrow b \rightarrow f}$ 联合起来所代表的，就是对所有 $\{t_i, \mathbf{x}_i\} \rightarrow \{t_f, \mathbf{x}_f\}$ 路径求和，因此就是 $\sum_{\mathbf{x}(t):i \rightarrow f}$ 。另一方面，注意到

$$\begin{aligned} & S_{i \rightarrow b}[\mathbf{x}(t)] + S_{b \rightarrow f}[\mathbf{x}(t)] = \\ &= \int_{t_i, \mathbf{x}_i}^{t_b, \mathbf{x}_b} dt L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) + \int_{t_b, \mathbf{x}_b}^{t_f, \mathbf{x}_f} dt L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) \\ &= \int_{t_i, \mathbf{x}_i}^{t_f, \mathbf{x}_f} dt L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) = S_{i \rightarrow f}[\mathbf{x}(t)]. \end{aligned} \quad (8.12)$$

所以我们可以将(8.11)式重写成

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{x}_b} \langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_b, t_b \rangle \langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_i, t_i \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{x}(t):i \rightarrow f} e^{i S_{i \rightarrow f}[\mathbf{x}(t)]/\hbar} = \langle \mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}_i, t_i \rangle. \end{aligned} \quad (8.13)$$

很显然，结果正好给出(8.8)。因此这就验证了费曼路径积分公式(8.9)的确满足时间演化的基本方程。

以上就是对于单粒子坐标表象下的时间演化算符的路径积分表述。这个表述和薛定谔方程其实是等价的，原则上，只要我们利用费曼给出的公式(8.9) 计算出任意 $\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle$ ，那根据方程(8.7)，我们就能得到波函数的时间演化

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{x}'} \langle \mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t' \rangle \psi(\mathbf{x}', t'). \quad (8.14)$$

这和求解薛定谔波动方程所得到的波函数演化完全等价。

对于多个全同粒子情形，人们同样可以找到相应 $\langle \{\mathbf{x}\}_f, m, t_f | \{\mathbf{x}\}_i, n, t_i \rangle$ 的路径积分公式。不过这时候情况要稍微复杂一些，时间演化的基本方程(8.6)以及幺正性的要求允许 $\langle \{\mathbf{x}\}_f, m, t_f | \{\mathbf{x}\}_i, n, t_i \rangle$ 有更多的可能性。下一节我们将开始探讨这一问题。

8.2 *路径的拓扑类和编织

首先说明一下，这一节标题中的编织英文是Braid，在文献中它通常是特指 $2+1$ 维情形的，在中文里通常将相应的群(后面会定义这个概念)翻译成编织群或者辫子群，两者没有区别。但我们这里是要统一处理 $2+1$ 维情形和 $3+1$ 维情形，所以我们这几节中的编织具有更广一些的含义，为了以示区别，我们将 $2+1$ 维情形的相应群称作辫子群，而将 $2+1$ 维情形和 $3+1$ 维情形的群统称为编织群(虽然在 $3+1$ 维它其实是一个置换群)。

假设我们将 N 个全同粒子在 t_a 时刻的 N 个位置标记为 $\{\mathbf{x}_{1,a}, \mathbf{x}_{2,a}, \dots, \mathbf{x}_{N,a}\}$ ，同样将在 t_b 时刻的 N 个位置标记为 $\{\mathbf{x}_{1,b}, \mathbf{x}_{2,b}, \dots, \mathbf{x}_{N,b}\}$ 。并且对于这些粒子从 t_a 时刻的位形 $\{\mathbf{x}\}_a = \{\mathbf{x}_{1,a}, \mathbf{x}_{2,a}, \dots, \mathbf{x}_{N,a}\}$ 运动到 t_b 时刻的位形 $\{\mathbf{x}\}_b = \{\mathbf{x}_{1,b}, \mathbf{x}_{2,b}, \dots, \mathbf{x}_{N,b}\}$ ，假设我们在时空中画出每一个粒子的运动路径，很明显这些路径可能会如图(8.2)所示。但是由于全同粒子不可分辨，所以我们其

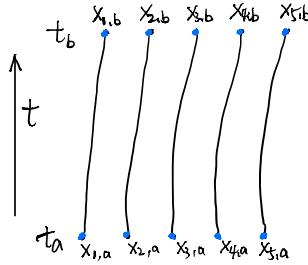


图 8.2: 多个全同粒子从 t_a 时刻到 t_b 时刻的可能路径。

实根本不可能知道 t_b 时刻的哪个位置来源于 t_a 时刻的哪个粒子，这些粒子完全有可能中途发生置换，因此图(8.3)所示的路径同样可能，而且我们实际

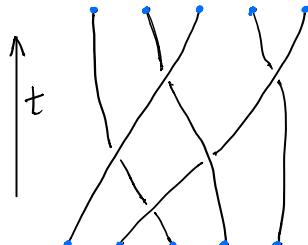


图 8.3: 多个全同粒子从 t_a 时刻到 t_b 时刻的另一种可能路径。

上无法在物理上将它们和图(8.2)所示的路径区分开来。实际上，从 $\{\mathbf{x}\}_a$ 位

形到 $\{\mathbf{x}\}_b$ 位形, 图(8.3)这样的有比较复杂交叉关系的路径才是典型的。

为了方便下面的分析, 现在我们将图(8.3)所示的典型路径进行连续形变, 但是保持路径之间的交叉关系不变, 读者很容易看出, 我们总可以将图(8.3)这样的路径连续变形为图(8.4)所示的这种比较标准的形式。实

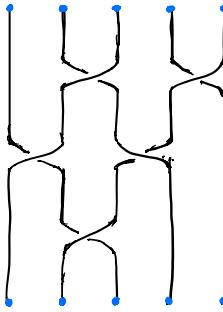
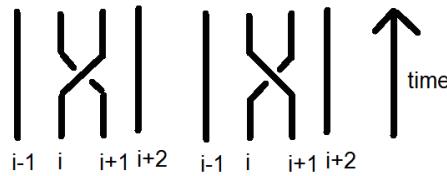
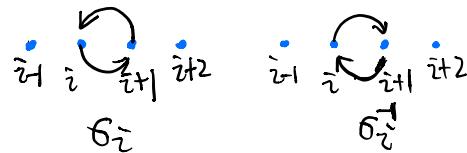


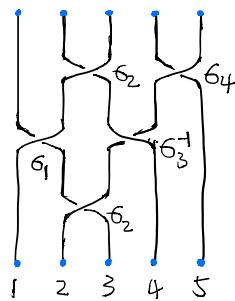
图 8.4: 全同粒子路径的标准形式。

际上, 多个全同粒子从 t_a 时刻 $\{\mathbf{x}\}_a$ 位形到 t_b 时刻 $\{\mathbf{x}\}_b$ 位形的任何路径, 我们总是可以在保持路径之间交叉关系的前提下, 将它们连续变形为类似于图(8.4)所示的这种标准形式。在数学上, 对于两组起末两端固定的路径, 如果在保持交叉关系的前提下可以让它们通过路径的连续形变相互过渡, 我们就说这两组路径在拓扑上等价, 或者说它们属于全同粒子路径的同一个拓扑等价类! 根据这个定义图(8.3)所示的路径与图(8.4)所示拓扑等价, 属于同一拓扑等价类。相反, 图(8.2)所示的路径与图(8.3)所示的路径就属于两个不同的拓扑等价类。因此, 给定 t_a 时刻与 t_b 时刻的位形, 全同粒子的路径可以分成多个不同的拓扑等价类, 每一个拓扑等价类的路径都可以连续形变为类似于图(8.4)这样的标准形式。

从图(8.4)中我们可以发现, 如果我们在纸面上表现全同粒子的路径, 那这些标准路径非常有规律, 实际上, 你很容易发现它可以由对路径的一些基本编织操作生成。为了让读者看得更清楚一点, 下面我们来定义这些基本编织操作, 首先我们把 N 个空间坐标标记成 $1, 2, \dots, N$, 并按照从左到右的顺序排成一行表现在纸面上。我们定义编织操作 σ_i 为将第 i 个位置处的路径逆时针与相邻的第 $i + 1$ 位置的路径交换顺序, 如图(8.5)左边这幅图所示。如果这种顺序交换是按照顺时针方式进行, 如图(8.5)右边这幅图所示, 那我们就将之定义成 σ_i^{-1} , 称作 σ_i 的逆操作, 至于为什么是逆操作我们很快就能看到。如果忘记时间坐标, 只关心这两个编织操作在空间上形成的轨道, 那从上方往下俯视, σ_i 和 σ_i^{-1} 将如图(8.6)所示。

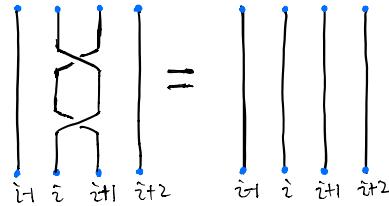
图 8.5: 左图是 σ_i , 右图是 σ_i^{-1} .(图片来自于网络)图 8.6: 左图是 σ_i , 右图是 σ_i^{-1} .

我们将时间上先后进行的两个编织操作定义为这两个编织操作相乘，先进行的编织操作写在乘式的右边，后进行的编织操作写在乘式的左边。当然，有时候两个编织操作的先后顺序对结果并没有影响。我们定义任何两个编织操作相乘的结果依然是一个编织操作(通常是更复杂一点的编织操作)。利用这样的编织乘法，我们就可以把图(8.4)所对应的编织操作写成 $(\sigma_4\sigma_2)(\sigma_3^{-1}\sigma_1)(\sigma_2)$ ，如图(8.7)所示。根据这样的编织乘法，读者很

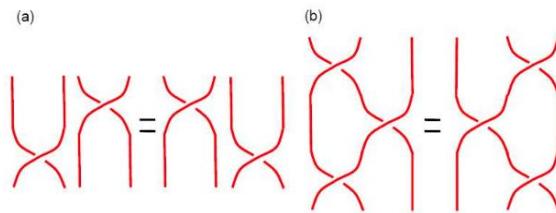
图 8.7: 编织操作 $(\sigma_4\sigma_2)(\sigma_3^{-1}\sigma_1)(\sigma_2)$.

容易验证， $\sigma_i\sigma_i^{-1}$ 以及 $\sigma_i^{-1}\sigma_i$ 的结果在拓扑上都等价于不进行任何编织，如图(8.8)所示，我们记为 $\sigma_i\sigma_i^{-1} = \sigma_i^{-1}\sigma_i = 1$ ，这就是为什么我们称 σ_i^{-1} 为 σ_i 的逆操作的原因。

通过将路径进行连续形变，我们很容易证明如图(8.9)所示的等价关系。

图 8.8: $\sigma_i^{-1}\sigma_i = 1$.

我们可以将这两个等价关系写成如下方程

图 8.9: 左图表示当 $|i - j| \geq 2$ 时, $\sigma_i\sigma_j = \sigma_j\sigma_i$ 。右图表示 $\sigma_i\sigma_{i+1}\sigma_i = \sigma_{i+1}\sigma_i\sigma_{i+1}$ 。(图片来自于网络)

$$\begin{aligned} \sigma_i\sigma_j &= \sigma_j\sigma_i, \quad \text{for } |i - j| \geq 2 \\ \sigma_i\sigma_{i+1}\sigma_i &= \sigma_{i+1}\sigma_i\sigma_{i+1}. \end{aligned} \tag{8.15}$$

上面这个式子的后一个方程尤为基本和重要, 虽然我们依然是用纸面上的基本关系来表达它, 但正是因为有了这个方程, 我们在纸面上表现的这些路径才能算是 $2+1$ 维时空或者 $3+1$ 维时空中的路径, 而不仅仅只是纸面上的路径。

每一个编织操作我们称之为一个编织群元, 很显然, 所有的编织群元都可以通过将一些 σ_i 或者 σ_i^{-1} 这样的基本编织群元乘起来生成。比方说图(8.4)所对应的编织操作 $(\sigma_4\sigma_2)(\sigma_3^{-1}\sigma_1)(\sigma_2)$ 就是一个编织群元。两个编织群元 g_1 和 g_2 的乘积 g_2g_1 就定义为相应的两个编织操作相乘, g_2g_1 依然对路径的一种编织, 因此也是一个编织群元。也即是说, 所有可能的编织群元的集合在乘积关系下是封闭的。不进行任何编织就称为单位群元, 记为1。读者想一下就能明白, 对于任何一种复杂的编织操作 g , 我们都可以找到一个“反向编织操作” g^{-1} , 使得两者乘起来的结果拓扑等价于1, 我们

称 g^{-1} 为 g 的逆。因此，任何一个编织群元都有一个逆元。在数学上，一个集合，如果其元素之间可以进行某种乘法运算⁶，并且集合本身在这种乘法下保持封闭，而且集合中存在一个单位元，且任何元素都有一个乘法逆元，这样的集合数学家称之为群，集合中的元素就称之为群元。因此，对 N 个粒子的路径的所有可能编织操作构成了一个群，我们可以称之为编织群。 σ_i 就称为编织群的生成元，它们满足基本代数关系(8.15)。

但是，2维空间(加上一维时间就是2+1维时空)中粒子的编织群和3维空间粒子的编织群不一样！下面我们就来研究这两者的区别。

辫子群与置换群，2+1维与3+1维的区别

编织群由一些基本的编织操作 σ_i 生成， σ_i 表示将一对相邻粒子逆时针交换位置，如果是顺时针交换位置我们就称之为 σ_i^{-1} ，如图(8.6)所示。但是，逆时针编织和顺时针编织的区别是2+1维时空的特殊情况，如果在3+1维时空，那这两者实际上拓扑等价，即 $\sigma_i^{-1} = \sigma_i$ ，也即是说这时候图(8.5)中左右两种情况实际上拓扑等价(之所以左右两边的图形看起来不等价，是因为我们无法在纸面上在表现出时间维的同时表现出3维空间)。换言之，对于3+1维时空，编织群的生成元额外满足如下代数关系

$$\sigma_i^2 = 1. \quad (8.16)$$

即，将同一个基本编织操作连续进行两次等价于不编织，或者说，将两个粒子连续交换位置两次等价于不交换。

为了证明(8.16)式，我们注意到 σ_i^2 实际上就等价于将一个粒子围绕着另外一个粒子转一圈。如果我们忘记时间维，将注意力集中在这种编织操作的空间轨道上，我们就能发现，在2维空间，一个粒子围绕着另一个粒子转一圈不能拓扑等价于不转圈，如图(8.10)右图所示。但是，在3维以上空间，由于空间维度更多，给轨道的拓扑形变留下了足够的余地，所以一个粒子围绕着另外一个粒子转一圈完全可以连续变形为不转圈，如图(8.10)左图所示。因此，这就证明了在3维以及3维以上空间， $\sigma_i^2 = 1$ 。

正是因为在3+1维时空基本编织操作额外满足代数关系式(8.16)，即两个粒子逆时针交换位置还是顺时针交换位置其实没有区别，所以这时候的路径编织在一定意义上是平凡的，我们只需要用 N 个粒子之间的位置置换来考虑问题就足够了。这时候的编织群实际上就是位置置换群，通常

⁶注意，一般来说群的乘法不一定满足交换律。

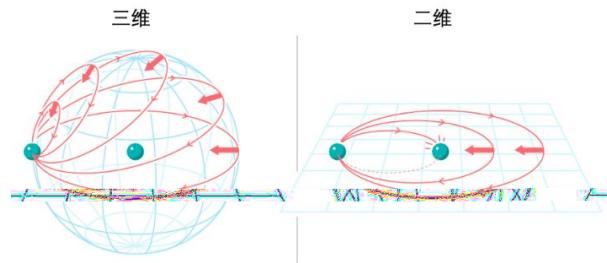


图 8.10: 图片来源: 5W Infographics / Quanta Magazine

记作 S_N 。只有在 $2 + 1$ 维时空, 对路径的编织关系才是非平凡的, 这时候对 N 个粒子路径的编织群我们称之为辫子群(Braid Group), 记为 B_N , 因为这时候对路径编织的结果很像发辫。

很明显, N 个全同粒子从 t_a 时刻的 $\{\mathbf{x}\}_a$ 位形演化到 t_b 时刻的 $\{\mathbf{x}\}_b$, 其所有可能演化路径可以分成许多个不同的拓扑等价类, 每一个拓扑等价类的路径图都可以用类似于图(8.4)这样的标准形式来代表, 因此与编织群的群元 g 一一对应。对于 $2 + 1$ 维时空, $g \in B_N$, 而对于 $3 + 1$ 维时空, $g \in S_N$ 。粒子从 t_i 时刻经过 g_1 类路径演化到 t_b 时刻, 接着再从 t_b 时刻经过 g_2 类路径演化到 t_f 时刻, 其总效果就是粒子从 t_i 时刻经过 g_2g_1 类路径直接演化到 t_f 时刻, 可以写成

$$i \xrightarrow{g_1} b \xrightarrow{g_2} f \Leftrightarrow i \xrightarrow{g_2g_1} f. \quad (8.17)$$

这里我们定义 g_1 和 g_2 两类路径相乘为将它们的标准路径图在时间上先后对接起来, 如此一来, 这种路径拓扑类的乘法与相应编织群元的乘法刚好一一对应。

编织群作为一个群, 它在数学上允许一种美妙的附加结构, 称之为群的表示。具体来说, 就是对于每一个群元 g , 我们都将它对应到希尔伯特空间的一个么正算符 $U(g)$, 并且让这种对应保持群的乘法关系, 即满足

$$U(g_2)U(g_1) = U(g_2g_1). \quad (8.18)$$

这种满足(8.18)式的从一个群到希尔伯特空间么正算符的映射关系就称为群的么正表示。当然, 这种么正表示有可能是平凡的, 比方说 $U(g) = 1$ 显然满足(8.18)式, 从而构成编织群的么正表示, 但这个么正表示显然是一个平凡的表示。然而编织群, 无论是 $2 + 1$ 维的 B_N 还是 $3 + 1$ 维的 S_N , 都可以

有非平凡的幺正表示。正因为编织群可以有这些非平凡的幺正表示，就使得多个全同粒子的路径积分有了更多的可能性。

8.3 *全同粒子统计

8.3.1 全同粒子路径积分

下面我们来考察 N 个全同粒子的路径积分公式。首先，假设我们将粒子的所有路径按照拓扑等价关系分类，每一类对应一个编织群元 g ，并且假设我们可以引入一个非平凡的 $U(g)$ 。由于 $U(g)$ 只依赖于路径的拓扑类，在路径的连续形变下将保持不变，而路径的连续形变是一种局域操作，它会改变系统的局域信息，这就说明 $U(g)$ 对系统的局域信息不能有作用，它只能作用在非局域信息的指标 $n = 1, 2, \dots, M$ 上。考虑到这一点我们就可以给出如下路径积分公式

$$\langle \{\mathbf{x}\}_b, m, t_b | \{\mathbf{x}\}_a, n, t_a \rangle = \frac{1}{G} \sum_g \left[\langle m | U(g) | n \rangle \sum_{\{\mathbf{x}(t)\} \in g: a \rightarrow b} e^{iS_{a \rightarrow b}[\{\mathbf{x}(t)\} \in g] / \hbar} \right] \quad (8.19)$$

式中下标 $\{\mathbf{x}(t)\} \in g$ 表示属于拓扑类 g 的一组路径，式中最后的求和 \sum_g 表示对所有的路径拓扑类求和，也即是对编织群的所有群元求和，式中的 G 表示编织群的群元总数目。

相比于单粒子路径积分公式，(8.19)的关键不同之处在于将多粒子路径按照拓扑等价类来处理了，一个等价类之内的每一条路径对路径积分的贡献和单粒子情形类似，都是 $e^{iS/\hbar}$ ，但这不是全部贡献，对于每一个等价类 g ，我们还要额外乘以幺正表示 $U(g)$ 。

根据我们在附录中关于单粒子路径积分幺正性的证明可以类似地知道， $\sum_g \sum_{\{\mathbf{x}(t)\} \in g: a \rightarrow b} e^{iS_{a \rightarrow b}[\{\mathbf{x}(t)\} \in g] / \hbar}$ 是幺正的，又由于 $U(g)$ 是幺正算符，所以我们可以知道(8.19)给出来的 $\langle \{\mathbf{x}\}_b, m, t_b | \{\mathbf{x}\}_a, n, t_a \rangle$ 是幺正的。这就证明了路径积分公式(8.19)的幺正性。

下面我们来验证(8.19)式满足时间演化的基本方程(8.6)。首先我们注意到由方程(8.18)容易有

$$\sum_k \langle m | U(g_2) | k \rangle \langle k | U(g_1) | n \rangle = \langle m | U(g_2 g_1) | n \rangle. \quad (8.20)$$

其次, 根据(8.19)式我们有

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\{\mathbf{x}\}_b, k} \langle \{\mathbf{x}\}_f, m, t_f | \{\mathbf{x}\}_b, k, t_b \rangle \langle \{\mathbf{x}\}_b, k, t_b | \{\mathbf{x}\}_i, n, t_i \rangle \\
 = & \frac{1}{G^2} \sum_{g_1, g_2} \sum_k \left[\langle m | U(g_2) | k \rangle \langle k | U(g_1) | n \rangle \right. \\
 & \times \left. \sum_{\{\mathbf{x}\}_b} \left(\sum_{\{\mathbf{x}(t)\} \in g_2: b \rightarrow f} e^{iS_{b \rightarrow f}[\{\mathbf{x}(t)\} \in g_2]/\hbar} \right) \left(\sum_{\{\mathbf{x}(t)\} \in g_1: i \rightarrow b} e^{iS_{i \rightarrow b}[\{\mathbf{x}(t)\} \in g_1]/\hbar} \right) \right] \\
 = & \frac{1}{G^2} \sum_{g_1, g_2} \left[\langle m | U(g_2 g_1) | n \rangle \times \left(\sum_{\{\mathbf{x}(t)\} \in g_2 g_1: i \rightarrow f} e^{iS_{i \rightarrow f}[\{\mathbf{x}(t)\} \in g_2 g_1]/\hbar} \right) \right]. \quad (8.21)
 \end{aligned}$$

式中的第二个等于号我们利用了路径拓扑类的乘法, 以及我们在单粒子路径积分中相关推导的经验。现在, 在(8.21)式中令 $g_2 g_1 = g$, 并利用 $g_2 = g g_1^{-1}$ 消去 g_2 , 则 $\sum_{g_1, g_2} = \sum_{g, g_1}$, 而(8.21)式最后的式子就可以写成

$$\frac{1}{G^2} \sum_{g, g_1} \left[\langle m | U(g) | n \rangle \times \left(\sum_{\{\mathbf{x}(t)\} \in g: i \rightarrow f} e^{iS_{i \rightarrow f}[\{\mathbf{x}(t)\} \in g]/\hbar} \right) \right]. \quad (8.22)$$

注意到(8.22)式的被求和式子实际上与 g_1 无关, 因此对所有 g_1 的求和就简单地等于群元数目 G , 刚好将表达式中的 $\frac{1}{G^2}$ 抵消成 $\frac{1}{G}$ 。

综合以上这些结果, 我们就能得到

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\{\mathbf{x}\}_b, k} \langle \{\mathbf{x}\}_f, m, t_f | \{\mathbf{x}\}_b, k, t_b \rangle \langle \{\mathbf{x}\}_b, k, t_b | \{\mathbf{x}\}_i, n, t_i \rangle \\
 = & \frac{1}{G} \sum_g \left[\langle m | U(g) | n \rangle \times \left(\sum_{\{\mathbf{x}(t)\} \in g: i \rightarrow f} e^{iS_{i \rightarrow f}[\{\mathbf{x}(t)\} \in g]/\hbar} \right) \right] \\
 = & \langle \{\mathbf{x}\}_f, m, t_f | \{\mathbf{x}\}_i, n, t_i \rangle. \quad (8.23)
 \end{aligned}$$

这样就完成了对方程(8.6)的验证。

8.3.2 2 + 1维以及3 + 1维的讨论

正如我们已经说过的, 多粒子路径编织群的幺正表示 $U(g)$ 作用在与局域信息相互独立的非局域信息空间上, 数学上称这样的希尔伯特空间为编织群的幺正表示空间, 这个空间的基矢量是 $|n\rangle$, $n = 1, 2, \dots, M$, 空间维数 M 称之为幺正表示的维数。由于假定这样的表示空间和系统的局域信息相互独立, 因此系统的任何局域扰动对它都不会产生影响, 这就意

味着这样的表示空间不会在对系统的局域扰动之下分裂成多个更小的表示空间。数学上常常称具有这种性质的表示空间为不可约表示空间。矩阵 $\langle m|U(g)|n\rangle$ 就称为不可约表示矩阵，或者简称为不可约表示。 M 就是这个不可约表示的维数。

数学家告诉我们，由于要满足方程(8.20)，并非任意维度的希尔伯特空间都能构成编织群 B_N 或者 S_N 的不可约表示空间。最简单的不可约表示当然就是1维表示，即 $M = 1$ 。由于1行1列的么正矩阵必定是一个相位因子，因此这时候么正算符 $U(g)$ 在这样的1维表示空间的作用只能是一个相位因子，可以记为 $e^{-i\varphi(g)}$ 。很显然的是，无论是 B_N 还是 S_N 都有一个平凡的一维表示，这时候 $U(g)$ 在这个1维表示空间上的作用恒等于1，我们称这样的表示为恒等表示。

2 + 1维情形

但是对于2 + 1维情形，这时候编织群是辫子群 B_N ，而 B_N 有非常多的不平凡一维表示。不妨假设逆时针编织 σ_i 在某个一维表示中被表示成了 $e^{-i\theta_i}$ ，则很显然顺时针编织 σ_i^{-1} 将被表示成 $e^{i\theta_i}$ 。由于编织群的表示要保持乘法关系，特别的是要保持(8.15)式的乘法关系，则我们有 $e^{-i\theta_i}e^{-i\theta_{i+1}}e^{-i\theta_i} = e^{-i\theta_{i+1}}e^{-i\theta_i}e^{-i\theta_{i+1}}$ ，即有

$$e^{-i\theta_i} = e^{-i\theta_{i+1}} = \dots = e^{-i\theta}. \quad (8.24)$$

但是，除此之外，辫子群 B_N 无法对 θ 施加更多的约束，也就是说任何相位因子 $e^{-i\theta}$ 都是允许的。这就告诉我们，在一维表示情形中，当我们将两个邻近的2 + 1维全同粒子逆时针交换顺序时(即逆时针编织)，波函数可以多出一个任意的相位因子 $e^{-i\theta}$ ，而顺时针交换顺序则会多出 $e^{i\theta}$ 。由于 θ 任意⁷，所以人们将这样的2 + 1维全同粒子称作任意子！严格一点说是阿贝尔任意子。所谓的阿贝尔是指，在这种一维表示情形下， B_N 的表示矩阵是相位因子，它们满足乘法交换律，在群理论中，阿贝尔作为形容词指的就是满足乘法交换律！

对阿贝尔任意子的阐述很容易使我们想到，如果 B_N 的不可约表示空间不是一维，而是2维以上，那这时候表示矩阵 $\langle m|U(g)|n\rangle$ 就真是一个矩阵而不是可交换的复数了，矩阵不满足乘法交换律，所以对于这种情形人们就把相应的全同粒子称作非阿贝尔任意子。

⁷实际上，在编织张量范畴理论中可以证明， θ 只能取 $2\pi p/m$ (p, m 是两个互素的整数)的形式。

任意子这种神奇的粒子最早完全是理论凝聚态物理学家的一个预言，但是最近的实验表明，阿贝尔任意子在特定的二维系统中真的存在，人们已经在实验中发现它们了。不仅阿贝尔任意子，许多凝聚态物理学家相信非阿贝尔任意子也能在某些特定的二维系统(比如某些分数量子霍尔系统)中存在。关于哪些系统中可能找到非阿贝尔任意子，理论学家已经有了不少预言，然而由于对实验要求很高，到目前为止，虽然有些观测迹象表明它们的确存在，但人们还没有找到很确凿的证据。然而非阿贝尔任意子比阿贝尔任意子更为神奇，也更为重要，其中的一个原因在于，理论研究表明，有一些非阿贝尔任意子可以用来实现通用的容错量子计算！从长远来看，这也许是最重要的量子计算实现方案。

非阿贝尔任意子实现容错量子计算的原理其实不难理解。为了说清楚这一点，让我们设想对处于 $|\{\mathbf{x}\}, n\rangle$ 态的这 N 个任意子进行一个编织操作 g ，编织完了之后让这 N 个全同任意子的位形回到 $\{\mathbf{x}\}$ ，因此整个过程的效果类似于图(8.4)所示。很显然，这样的编织操作只会影响指标 n 标记的非局域信息，具体来说，这样的编织操作 g 其实就相当于在 $|\{\mathbf{x}\}, n\rangle$ 上作用 $U(g)$ ，从而有

$$|\{\mathbf{x}\}, n\rangle \rightarrow U(g)|\{\mathbf{x}\}, n\rangle = \sum_m |\{\mathbf{x}\}, m\rangle \langle m|U(g)|n\rangle. \quad (8.25)$$

现在，设想我们将要进行计算处理的量子态编码成非局域信息 $|\{\mathbf{x}\}, \psi\rangle = \sum_n \psi_n |\{\mathbf{x}\}, n\rangle$ ，式中复叠加系数 ψ_n 所包含的就是我们要处理的量子信息。则在编织操作 g 之下我们将有

$$|\{\mathbf{x}\}, \psi\rangle \rightarrow U(g)|\{\mathbf{x}\}, \psi\rangle = \sum_m |\{\mathbf{x}\}, m\rangle \sum_n \langle m|U(g)|n\rangle \psi_n. \quad (8.26)$$

很显然，编织操作 g 相当于对量子信息 ψ_n 进行了如下计算

$$\psi_m \rightarrow \sum_n \langle m|U(g)|n\rangle \psi_n. \quad (8.27)$$

因此，只要合适地利用对非阿贝尔任意子的编织操作，我们就能实现想要的量子计算。

这种计算的幺正矩阵 $\langle m|U(g)|n\rangle$ 是非局域的，系统的任何局域扰动都不能影响它。这一点正是利用非阿贝尔任意子进行量子计算的巨大优点，因为这样的计算过程将会天然对环境的退相干效应产生免疫。这是因为，退相干主要是因为系统和环境之间存在大量的局域相互作用而产生的，

现在既然这样的局域相互作用没法影响 $\langle m|U(g)|n\rangle$ ，那这样的量子计算当然就会对退相干免疫。寻找有合适非阿贝尔任意子的量子系统以及如何利用编织操作进行具体的量子计算，这些就是当前拓扑量子计算研究的核心课题。在拓扑量子计算中，所谓的计算其实就是一连串的编织操作，如图(8.11)所示(注意图中水平方向才是时间方向)。

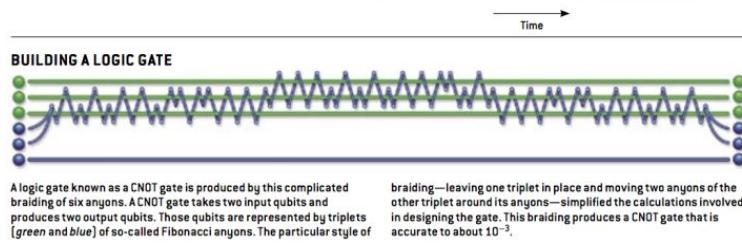


图 8.11: 摘自 Collins, Graham P. "Computing with quantum knots." *Scientific American* 294.4(2006):56-63

然而，一个存在任意子的二维系统通常不会只有一种类型的任意子，而是可以有多种不同的任意子类型，不同类型的任意子当然不是全同粒子，因此我们这里描述的全同粒子理论其实不能完整地描写任意子系统。对任意子系统的理论描述需要新的数学，这就是所谓的编织张量范畴理论，这是一个非常抽象的数学理论，它当然大大超出了我们这本书的范围，一个相对比较容易入门的读物是 Steven H. Simon 的在线讲义 “Topological Quantum”⁸。

回到我们的 N 个全同粒子系统。由于张成辫子群不可约表示空间的这些非局域信息也是由这 N 个全同任意子作为一个整体携带的，因此可以想见，至少在 N 足够大时，不可约表示空间的维数 M 将随着 N 的数目指数增长，即有

$$M \sim d^N. \quad (8.28)$$

类似这种关系我们其实很熟悉，比方说，每个量子比特的希尔伯特空间是2维，因此 N 个量子比特的总希尔伯特空间就是 2^N 维。所以式(8.28)中的 d 可以理解为每个任意子的非局域信息的维数，称作非阿贝尔任意子的量子维数。但是，不可思议的是，非阿贝尔任意子的 d 可以不是整数，甚至可

⁸<http://oxfordtopquantum.tiddlyspot.com/>

以是无理数，比方说有一种被称作斐波那契任意子的非阿贝尔任意子，它的 $d = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ 。

3 + 1维情形

3维空间或者3维以上空间和2维情形有根本性的不同，这时候编织群是 S_N ，即基本编织操作 σ_i 要额外满足代数关系 $\sigma_i = \sigma_i^{-1}$ ，或者说将两个粒子逆时针交换顺序和顺时针交换顺序结果是一样的，因此唯一体现路径编织的地方其实仅仅在于粒子的位置置换， S_N 其实就是 N 个粒子的置换群。这会带来一些根本性的不同，最大的不同在于，2 + 1维的编织由于逆时针编织和顺时针编织不同，所以必须跟随整个编织操作的时间演化，我们无法在一个固定的时刻定义2 + 1维编织操作。但是，对于粒子的位置置换来说，我们无需追究具体是如何置换的，或者说将两个粒子的位置坐标交换一下这样的操作可以在任何一个固定时刻都有定义。这使得我们可以定义作用在固定时刻量子态空间的置换算符，正如后文我们将要看到的，这样的算符其实是对量子态的一个对称变换，从而使得位置置换成为3 + 1维全同粒子系统的一种对称性，而置换群 S_N 就可以看成是一个对称群。而2 + 1维的辫子群 B_N 就不能简单理解为对称性，而是一个比对称性更抽象的概念，完整的数学描述要用编织张量范畴。

不过在具体定义3 + 1维的置换对称性之前，我们是统一用路径编织的概念来看待2 + 1维和3 + 1维的，只不过3 + 1维得额外满足 $\sigma_i^2 = 1$ 。对于编织群的一维表示 $e^{-i\theta}$ 来说，这意味着3 + 1维要额外满足

$$(e^{-i\theta})^2 = 1. \quad (8.29)$$

这意味着 $e^{-i\theta}$ 不能取任意值，而是仅仅只有 $e^{-i\theta} = \pm 1$ 这两种可能性。在数学上，这两种可能性分别对应置换群 S_N 仅有的两种1维不可约表示。

由于在3 + 1维， σ_i 就是将两个粒子的位置对换，而 N 个粒子的任意位置置换总能通过一系列的两两对换来实现(这里请读者自己用3个或者4个粒子的位置置换为例来看清这个结论的普遍性)，所以 $e^{-i\theta} = 1$ 的可能性就意味着，对 N 个粒子进行任意置换所产生的影响都是不变的因子1，即对于任何 g ，相应的一维表示相位因子均为 $e^{-i\varphi(g)} = 1$ ，这其实就是置换群的恒等表示。这种情形所描述的全同粒子就是所谓的全同玻色子。

而对于 $e^{-i\theta} = -1$ 这种情形，它必然意味着 N 个粒子的任何偶置换都产生因子1(即相应的 $e^{-i\varphi(g)} = 1$)，而任何奇置换都产生因子-1(即相应的 $e^{-i\varphi(g)} = -1$)。所谓偶置换就是可以实现为偶数个两两对换相乘的置换，

而所谓奇置换就是可以实现为奇数个对换相乘的置换。在我们现在的情形中，每个对换会贡献一个 -1 ，所以偶数个对换相乘产生的因子就是 1 ，而奇数个对换相乘产生的因子就是 -1 。这种情形称作置换群 S_N 的交错表示(alternating representation)。这种情形所描述的全同粒子就是所谓的全同费米子。

当然， $3+1$ 维编织群 S_N 也有2维以上的不可约表示。但是考虑到真实物理系统的一些附加限制，人们可以证明所有这些高于1维的不可约表示都不能描述真实的 $3+1$ 维全同粒子系统。证明中所需要的额外物理限制主要有两个：1. 任意粒子都有其反粒子，人们可以产生一对正反粒子，也可以让一对正反粒子相互湮灭。这一条物理限制当然早就被实验验证了，反粒子和反物质的概念可以说是现代物理学的常识。在历史上，反粒子的存在最早是狄拉克1928年在理论上预言的，1932年被C.D.安德森用实验证实。2. 粒子间的相互作用具有局域性。这也就是说，在同一时刻北京产生或者湮灭一对正反粒子对于南昌的实验结果不应该有任何影响。具体的证明过程非常复杂，原始论文⁹过于长我也不推荐读者阅读。大体思想也许是证明在上述两个物理约束下，编织群为 S_N 的全同粒子体系携带的所有信息在一定意义上都不能与局域信息相互独立，因此独立非局域信息的维度 $M = 1$ ，从而只能构成 S_N 的1维不可约表示，高于1维的不可约表示都不可行¹⁰。

一般来说，物理学和数学有很大的不同，物理学的不可行定理(No go theorem)的前提假设很容易出漏洞，人们不只一次地找到过各种物理学不可行定理的例外，因此这么复杂抽象的证明物理学家不一定会真正重视，这可能就是为什么曾经有一段时间有很多人在研究2维以上的不可约表示，称之为准统计(parastatistics)。不过在后来的理论物理研究进展中，人们发现高于1维的不可约表示的确没有出现过，没有人发现过任何自洽的物理理论可以容得下它们，实验中更是没有发现有需要准统计的迹象。也许有极小的可能出现意外，但今天人们已经普遍接受 $3+1$ 维只有玻色子和费米子这两种一维表示的结论了。值得注意的是， $3+1$ 维的这种情况和 $2+1$ 维非阿贝尔任意子情形有根本性的不同，后者的确是有丰富物理内涵的。

⁹S. Doplicher, R. Haag, and J. E. Roberts. Local observables and particle statistics. I. Comm. Math. Phys., 23:199 – 230, 1971. S. Doplicher, R. Haag, and J. E. Roberts. Local observables and particle statistics. II. Comm. Math. Phys., 35:49 – 85, 1974.

¹⁰一个等价的说法是，高于1维表示的准统计实际上等价于一些具有额外局域内部自由度的玻色或者费米子统计。

8.3.3 作为规范对称性的置换对称性

这一节我们将深入探讨置换是如何成为 $3 + 1$ 维全同粒子体系的一种对称性的。这里主要涉及到如下几个问题：1. 如何定义置换算符。2. 置换算符在全同粒子波函数上如何作用。3. 为什么全同粒子置换是一种特殊的规范对称性。

置换算符

前面我们说过，在 $3 + 1$ 维中编织群是一个置换群 S_N 。而对全同粒子的置换操作并不依赖于具体的置换过程，而是可以在任何一个瞬时定义。比方说，我们可以考察一个两粒子系统的位置本征态 $|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle$ ，注意，由于上面讨论过的原因，对于 $3 + 1$ 维情形，我们可以假定独立非局域信息的维数 $M = 1$ ，因此无需引入额外的量子数来区分不同的独立非局域信息。假设我们将这两个粒子分别标记为1、2，并规定狄拉克符号里第一个位置总是用来标记第1个粒子的状态，第二个位置总是用来标记第2个粒子的状态，因此 $|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle$ 就表示一个第1个粒子处在 \mathbf{x}_1 位置，第2个粒子处在 \mathbf{x}_2 位置的状态（当然，如我们前面说过的，类似于 \mathbf{x} 位置这样的说法是一个简化说法，实际上 \mathbf{x} 这样的符号中还可以包含粒子的自旋等内部量子数）。从而我们就可以定义置换算符 P_{12}

$$P_{12}|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle = |\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1\rangle. \quad (8.30)$$

P_{12} 的作用就是把两个粒子相互对换。我们也可以把这个对换理解为对这两个粒子瞬时进行的一个编织。注意，这和 $2 + 1$ 维中的编织操作有根本性的不同，后者依赖于我们具体是逆时针编织还是顺时针编织，因此必须考虑具体编织过程，像(8.30)这样的式子对于 $2 + 1$ 维的辫子群 B_N 是没有意义的。

根据(8.30)式的这个定义我们显然有 $P_{12}^2|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle = P_{12}|\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1\rangle = |\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle$ ，即有算符方程

$$P_{12}^2 = 1. \quad (8.31)$$

这个结果相应于 $3 + 1$ 维中基本编织操作所满足的 $\sigma_i^2 = 1$ 。另一方面，根据(8.30)式我们也很容易看到

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2 | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \rangle &= \delta(\mathbf{x}'_2 - \mathbf{x}_2)\delta(\mathbf{x}'_1 - \mathbf{x}_1) = \langle \mathbf{x}'_2, \mathbf{x}'_1 | \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 \rangle \\ &= \langle \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2 | P_{12}^\dagger P_{12} | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \rangle. \end{aligned} \quad (8.32)$$

这就意味着 $P_{12}^\dagger P_{12} = 1$, 从而(8.30)式定义的置换算符 P_{12} 是一个幺正算符, 结合(8.31)式我们就有

$$P_{12}^\dagger = P_{12} = P_{12}^{-1}. \quad (8.33)$$

(8.30)式很容易推广到对 N 个粒子的任意置换。为此我们以 g 表示对 $\{1, 2, \dots, N\}$ 的一个置换, 记这个置换的作用方式为, $g : i \rightarrow g(i)$, 即将 i 置换为 $g(i)$ 。则可以仿照(8.30)式定义对 N 个粒子的置换算符 P_g 如下¹¹

$$P_g |\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle = |\mathbf{x}_{g(1)}, \mathbf{x}_{g(2)}, \dots, \mathbf{x}_{g(N)}\rangle. \quad (8.34)$$

完全类似于两个粒子的情形, 我们也可以证明 P_g 必定为幺正算符。

另一方面, 正如我们前面提到过的, N 个粒子的任意置换必定可以分解成相继进行的一连串两两对换, 因此对 N 个粒子的任意置换算符必定也可以写成一连串的两粒子对换算符的乘积。比方说, 对于 3 个粒子情形, 假设我们考虑如下置换

$$g : \{1, 2, 3\} \rightarrow \{2, 3, 1\}. \quad (8.35)$$

很容易看出来, 这个置换操作和下面一串操作的效果是一样的

$$\{1, 2, 3\} \rightarrow \{2, 1, 3\} \rightarrow \{2, 3, 1\}. \quad (8.36)$$

按照群乘法的定义, 相继进行的两个操作对应于两个群元相乘, 根据我们前面的约定, 先进行的操作在乘号的右边, 后进行的操作在乘号的左边, 因此(8.36)中的这一串操作就可以写成 $(13)(12)$ 。这里符号 (ij) 表示将 i, j 对换。也即是说, (8.35)式的 $g = (13)(12)$, 很明显这是一个偶置换。置换算符当然也要满足置换群乘法, 因此相应的置换算符也必然可以写成 $P_g = P_{13} P_{12}$ 。由于前面证明过两个粒子的对换算符是幺正算符, 从而这里的 P_g 也必定为幺正算符, 这是另一种证明置换算符为幺正算符的方法。实际上, 我们定义的置换算符构成了置换群的幺正表示。

将任意置换分解成一串两两对换相乘也有助于我们求出它的逆操作, 为此我们只要注意到任何对换的逆操作是它本身。以上一段中的 $g =$

¹¹ 非常细心的读者可能会注意到一个不重要的细节, 即对粒子本身的置换和对局域变量 \mathbf{x} 的置换其实是有区别的, 但在我们的处理中故意混淆了这个细节性的区别, 因为否则的话这里关于置换算符的定义以及后面关于置换算符在全同粒子波函数上如何作用的推理过程都会变得更复杂, 这会不利于读者理解相关思路。更何况, 这个细节其实并不会影响我们将要得到的关键性结论(8.46)式。

(13)(12)为例, 其逆元是 $g^{-1} = [(13)(12)]^{-1} = (12)^{-1}(13)^{-1} = (12)(13)$ 。对于相应的置换算符就有 $P_{g^{-1}} = P_{12}P_{13} = [P_{13}P_{12}]^{-1} = P_g^{-1} = P_g^\dagger$ 。很显然, 偶置换的逆元将依然是一个偶置换, 而奇置换的逆元也是一个奇置换。一般地, 由于置换算符是置换群的么正表示, 所以我们有

$$P_{g^{-1}} = P_g^{-1} = P_g^\dagger. \quad (8.37)$$

假设置换算符 P_g 在任意量子态 $|\psi\rangle$ 上的作用结果为 $P_g|\psi\rangle = |\psi'\rangle$, 记相应的坐标表象表达式为 $\widehat{P}_g\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = \psi'(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ 。则根据(8.37)式和(8.34)式, 我们容易有 $\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N | P_g = \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N | P_{g^{-1}}^\dagger = \langle \mathbf{x}_{g^{-1}(1)}, \mathbf{x}_{g^{-1}(2)}, \dots, \mathbf{x}_{g^{-1}(N)} |$, 从而可以得到置换算符在波函数上的作用结果为

$$\begin{aligned} \widehat{P}_g\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) &= \psi'(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N | P_g | \psi \rangle \\ &= \langle \mathbf{x}_{g^{-1}(1)}, \mathbf{x}_{g^{-1}(2)}, \dots, \mathbf{x}_{g^{-1}(N)} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{x}_{g^{-1}(1)}, \mathbf{x}_{g^{-1}(2)}, \dots, \mathbf{x}_{g^{-1}(N)}) \end{aligned} \quad (8.38)$$

由于 g 置换将原来的 $\{\mathbf{x}_{g^{-1}(1)}, \mathbf{x}_{g^{-1}(2)}, \dots, \mathbf{x}_{g^{-1}(N)}\}$ 置换到了 $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\}$, 所以上面这个式子的含义其实就是, 置换算符作用以后 $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\}$ 位置的波函数其实就是原来 $\{\mathbf{x}_{g^{-1}(1)}, \mathbf{x}_{g^{-1}(2)}, \dots, \mathbf{x}_{g^{-1}(N)}\}$ 位置的波函数。记多粒子位形 $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\} = \{\mathbf{x}\}$, 则有 $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = \psi(\{\mathbf{x}\})$ 。再示意性地记

$$\{\mathbf{x}_{g^{-1}(1)}, \mathbf{x}_{g^{-1}(2)}, \dots, \mathbf{x}_{g^{-1}(N)}\} = g^{-1}\{\mathbf{x}\}. \quad (8.39)$$

则可将(8.38)式重写成,

$$\widehat{P}_g\psi(\{\mathbf{x}\}) = \psi(g^{-1}\{\mathbf{x}\}). \quad (8.40)$$

置换算符在全同粒子波函数上的作用

以上讨论的是置换算符在任意 N 粒子体系上的作用, 这些粒子其实不必是全同粒子。对于全同粒子体系来说, 情况会有些特殊, 因为这时候体系的波函数并不是任意多变量函数, 而是由全同粒子路径积分给出来的波函数。

具体来说, 根据(8.7)式我们知道, 任意 t 时刻的波函数 $\psi(\{\mathbf{x}\}, t)$ 总是由某个初始 t_0 时刻的波函数按照下式演化而来

$$\psi(\{\mathbf{x}\}, t) = \langle \{\mathbf{x}\} | \psi(t) \rangle = \sum_{\{\mathbf{x}\}_0} \langle \{\mathbf{x}\}, t | \{\mathbf{x}\}_0, t_0 \rangle \psi(\{\mathbf{x}\}_0, t_0). \quad (8.41)$$

代入全同粒子的路径积分公式(8.19)即有,

$$\psi(\{\mathbf{x}\}, t) = \frac{1}{G} \sum_{g_1} \left[U(g_1) \sum_{\{\mathbf{x}\}_0} \sum_{\{\mathbf{x}\}_0 \xrightarrow{g_1} \{\mathbf{x}\}} e^{iS[\{\mathbf{x}(t)\} \in g_1]/\hbar} \psi(\{\mathbf{x}\}_0, t_0) \right]. \quad (8.42)$$

式中 $\sum_{\{\mathbf{x}\}_0 \xrightarrow{g_1} \{\mathbf{x}\}}$ 表示对从 $\{\{\mathbf{x}\}_0, t_0\}$ 到 $\{\{\mathbf{x}\}, t\}$ 的所有属于拓扑类 g_1 的路径求和。另外, 由于我们只需考虑置换群的1维表示, 所以式中的 $U(g_1)$ 实际上是一个相位因子, 即 $U(g_1) = e^{-i\varphi(g_1)}$ 。

下面我们考虑置换算符 \widehat{P}_g 在波函数上的作用, 根据(8.40)式我们有, $\widehat{P}_g \psi(\{\mathbf{x}\}, t) = \psi(g^{-1}\{\mathbf{x}\}, t)$, 对等号右边应用全同粒子波函数的路径积分公式(8.42)则有

$$\widehat{P}_g \psi(\{\mathbf{x}\}, t) = \frac{1}{G} \sum_{g_1} \left[U(g_1) \sum_{\{\mathbf{x}\}_0} \sum_{\{\mathbf{x}\}_0 \xrightarrow{g_1} g^{-1}\{\mathbf{x}\}} e^{iS[\{\mathbf{x}(t)\} \in g_1]/\hbar} \psi(\{\mathbf{x}\}_0, t_0) \right] \quad (8.43)$$

然而很显然, 路径 $\{\mathbf{x}\}_0 \xrightarrow{g_1} g^{-1}\{\mathbf{x}\}$ 和路径 $\{\mathbf{x}\}_0 \xrightarrow{g^{-1}g_1} \{\mathbf{x}\}$ 是一回事, 所以上面的表达式又可以写成

$$\widehat{P}_g \psi(\{\mathbf{x}\}, t) = \frac{1}{G} \sum_{g_1} \left[U(g_1) \sum_{\{\mathbf{x}\}_0} \sum_{\{\mathbf{x}\}_0 \xrightarrow{g^{-1}g_1} \{\mathbf{x}\}} e^{iS[\{\mathbf{x}(t)\} \in g^{-1}g_1]/\hbar} \psi(\{\mathbf{x}\}_0, t_0) \right] \quad (8.44)$$

令 $g^{-1}g_1 = g_2$, 利用 $g_1 = gg_2$ 将上式中的 g_1 代换成 g_2 , 进而将对 g_1 的求和代换成对 g_2 的求和, 从而即有

$$\begin{aligned} \widehat{P}_g \psi(\{\mathbf{x}\}, t) &= \frac{1}{G} \sum_{g_2} \left[U(gg_2) \sum_{\{\mathbf{x}\}_0} \sum_{\{\mathbf{x}\}_0 \xrightarrow{g_2} \{\mathbf{x}\}} e^{iS[\{\mathbf{x}(t)\} \in g_2]/\hbar} \psi(\{\mathbf{x}\}_0, t_0) \right] \\ &= U(g) \frac{1}{G} \sum_{g_2} \left[U(g_2) \sum_{\{\mathbf{x}\}_0} \sum_{\{\mathbf{x}\}_0 \xrightarrow{g_2} \{\mathbf{x}\}} e^{iS[\{\mathbf{x}(t)\} \in g_2]/\hbar} \psi(\{\mathbf{x}\}_0, t_0) \right] \\ &= U(g) \psi(\{\mathbf{x}\}, t). \end{aligned} \quad (8.45)$$

式中第2个等号我们利用了群表示关系 $U(gg_2) = U(g)U(g_2)$, 最后一个等号则是再次代入了波函数的路径积分公式(8.42)。

小结一下, 上面的推导结果告诉我们, 在置换算符的作用下, $3+1$ 维中的全同粒子波函数必定满足

$$\widehat{P}_g \psi(\{\mathbf{x}\}, t) = \psi(g^{-1}\{\mathbf{x}\}, t) = U(g) \psi(\{\mathbf{x}\}, t). \quad (8.46)$$

注意到这里的 $U(g) = e^{-i\varphi(g)}$ 是置换群的一维表示，因此这个结果告诉我们， $3+1$ 维全同粒子波函数仅有两种不同的可能性，对于全同玻色子，其波函数在任意置换下都将保持不变，我们称之为对称波函数。而对于全同费米子，其波函数在任何偶置换下将保持不变，但是在奇置换下都将出一个负号，特别的，对于任意两个粒子的对换，全同费米子波函数将相差一个负号，这样的波函数称之为反对称波函数。值得再次强调的是，这里诸如 \mathbf{x}_i 这样的位置坐标只是一个示意性的记号，它同时指代第*i*个粒子的坐标和自旋量子数等一切局域信息指标，因此我们的置换操作不仅仅是作用在坐标变量上，而是同时也作用在自旋量子数等变量上。当我们说全同粒子波函数是对称波函数或者反对称波函数时，我们指的不是波函数对于坐标变量的置换对称或者反对称，而是指它对所有局域变量的同时置换对称或反对称。

(8.46)式是一个坐标表象下的表达式，我们当然也可以写出与之相应的抽象希尔伯特空间表达式。利用 $\widehat{P}_g\psi(\{\mathbf{x}\}) = \langle\{\mathbf{x}\}|P_g|\psi\rangle$ ，很容易看出这个抽象表达式为

$$P_g|\psi\rangle = U(g)|\psi\rangle. \quad (8.47)$$

这是 $3+1$ 维全同粒子体系的任何量子态 $|\psi\rangle$ 都必须满足的表达式。对于一个*N*粒子体系而言，并非所有数学上可能的量子态都满足(8.47)，而只有满足(8.47)式的量子态才可能描写全同粒子体系的物理状态。假设记一个*N*粒子体系所有数学上可能的量子态集合为希尔伯特空间 \mathcal{H} ，则很容易看出来，满足(8.47)式能描述全同粒子体系的量子态集合为 \mathcal{H} 的一个子空间。对于全同玻色子体系而言， $U(g) = e^{-i\varphi(g)} = 1$ ，因此这个子空间中的任何量子态在置换算符 P_g 的作用下都得保持不变，我们称这样的子空间为对称态子空间，记为 \mathcal{H}_S 。而对于全同费米子体系而言，通常记相应的相位因子 $U(g) = e^{-i\varphi(g)} = \varepsilon(g)$ ，对于偶置换 $\varepsilon(g) = 1$ ，对于奇置换 $\varepsilon(g) = -1$ ，因此相应希尔伯特子空间中的任何量子态 $|\psi\rangle$ 都得满足 $P_g|\psi\rangle = \varepsilon(g)|\psi\rangle$ ，这样的希尔伯特子空间称作反对称态子空间，记为 \mathcal{H}_A 。

比方说，对于一个两粒子体系， $|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle$ 态显然属于 \mathcal{H} ，但它并不满足(8.47)式，从而既不属于 \mathcal{H}_S ，也不属于 \mathcal{H}_A ，因此它不能描写两个全同粒子的系统。但是，很容易验证 $|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle + |\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1\rangle$ 态在两粒子置换算符的作用下是不变的，因此它属于 \mathcal{H}_S ，能够描写两全同玻色子的某个物理状态。类似的也容易验证 $|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle - |\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1\rangle$ 属于 \mathcal{H}_A ，可以描写两全同费米子系统的某个物理状态。一个重要的问题是，给定一个*N*粒子系统的希尔伯特空

间 \mathcal{H} , 如何构建它的对称态子空间 \mathcal{H}_S 以及反对称态子空间 \mathcal{H}_A , 我们将在下一节中具体讨论这个问题。

置换对称性

置换其实是 $3+1$ 维全同粒子系统的一种对称性, 而且是一种规范对称性。为了看清楚这一点, 我们先来考察 $\langle\{\mathbf{x}\}_f|P_g^{-1}U(t_f, t_i)P_g|\{\mathbf{x}\}_i\rangle$, 根据(8.34)式, 我们显然有

$$\begin{aligned} \langle\{\mathbf{x}\}_f|P_g^{-1}U(t_f, t_i)P_g|\{\mathbf{x}\}_i\rangle &= \langle\{\mathbf{x}\}_f|P_g^\dagger U(t_f, t_i)P_g|\{\mathbf{x}\}_i\rangle \\ &= \langle g\{\mathbf{x}\}_f|U(t_f, t_i)|g\{\mathbf{x}\}_i\rangle = \langle g\{\mathbf{x}\}_f, t_f|g\{\mathbf{x}\}_i, t_i\rangle. \end{aligned} \quad (8.48)$$

式中 $g\{\mathbf{x}\} = \{\mathbf{x}_{g(1)}, \mathbf{x}_{g(2)}, \dots, \mathbf{x}_{g(N)}\}$ 。很明显, $\langle g\{\mathbf{x}\}_f, t_f|g\{\mathbf{x}\}_i, t_i\rangle$ 其实就是同步地将初末态的 N 个坐标进行了一个 $1, 2, \dots, N \rightarrow g(1), g(2), \dots, g(N)$ 的置换。仔细想一下人们就能明白, 这样的初末态同步置换根本不会影响路径的拓扑分类, 也不会影响路径的作用量(或者说, 由于全同粒子不可区分, 作用量在粒子置换下将不变), 因此, 根据路径积分公式(8.19), 我们将有 $\langle g\{\mathbf{x}\}_f, t_f|g\{\mathbf{x}\}_i, t_i\rangle = \langle\{\mathbf{x}\}_f, t_f|\{\mathbf{x}\}_i, t_i\rangle = \langle\{\mathbf{x}\}_f|U(t_f, t_i)|\{\mathbf{x}\}_i\rangle$ 。代入(8.48)式即有

$$\begin{aligned} \langle\{\mathbf{x}\}_f|P_g^{-1}U(t_f, t_i)P_g|\{\mathbf{x}\}_i\rangle &= \langle\{\mathbf{x}\}_f|U(t_f, t_i)|\{\mathbf{x}\}_i\rangle \\ \Leftrightarrow P_g^{-1}U(t_f, t_i)P_g &= U(t_f, t_i). \end{aligned} \quad (8.49)$$

即置换算符与时间演化算符对易。按照第六章中关于对称性的定义, 这就说明, $3+1$ 维全同粒子体系具有置换对称性, 置换算符 P_g 就是相应的幺正对称变换。特别的, 由于 $U(t_f, t_i) = \exp(-iH(t_f - t_i)/\hbar)$, 所以由(8.49)式我们必然还有 $[P_g, H] = 0$ 。

类似的, 对于海森堡绘景中的任何物理可观测量算符 $\mathcal{O}(t)$, 我们可以考察 $\langle\{\mathbf{x}\}_f, t_f|P_g^{-1}\mathcal{O}(t)P_g|\{\mathbf{x}\}_i, t_i\rangle = \langle g\{\mathbf{x}\}_f, t_f|\mathcal{O}(t)|g\{\mathbf{x}\}_i, t_i\rangle$ 。这个结果同样可以用路径积分公式来计算, 办法就是在 $\langle g\{\mathbf{x}\}_f, t_f|g\{\mathbf{x}\}_i, t_i\rangle$ 的路径积分计算中插入一个表达式 $\mathcal{O}(t)$ 。很明显, 对于全同粒子体系, 将初末态坐标进行同步置换对于这个中间时刻 t 的表达式 $\mathcal{O}(t)$ 不会有任何影响, 因此和上一段的论证完全一样, 我们将有 $\langle g\{\mathbf{x}\}_f, t_f|\mathcal{O}(t)|g\{\mathbf{x}\}_i, t_i\rangle = \langle\{\mathbf{x}\}_f, t_f|\mathcal{O}(t)|\{\mathbf{x}\}_i, t_i\rangle$, 进一步就能得到

$$P_g^{-1}\mathcal{O}(t)P_g = \mathcal{O}(t). \quad (8.50)$$

即置换算符和所有物理可观测量均对易。换言之，全同粒子体系的任何物理可观测量在粒子置换下都得保持不变。这意味着，对于全同粒子体系，有一些很简单的算符其实是不可观测的，比方说位置算符 \mathbf{X}_1 就不是可观测量，因为在位置置换下它无法不变，但是算符 $(\mathbf{X}_1 + \mathbf{X}_2 + \dots + \mathbf{X}_N)/N$ 却是可观测的，因为它在粒子置换下显然不变。这其实很好理解，由于全同粒子的不可区辨性，人们测量粒子坐标的时候实际上无法知道测量结果来自于 N 个粒子中的哪一个，因此结果是只能测到 $(\mathbf{X}_1 + \mathbf{X}_2 + \dots + \mathbf{X}_N)/N$ 这类算符的本征值，而根本无法测量到 \mathbf{X}_1 的本征值。

由于置换算符与全同粒子体系的所有物理可观测量均对易，因此我们就可以把这些可观测量算符限制在对称态子空间 \mathcal{H}_S 或者限制在反对称态子空间 \mathcal{H}_A 上，也即是说，任意可观测量 \mathcal{O} 作用在任何对称态上结果将依然是对称态，同样，可观测量 \mathcal{O} 作用在任何反对称态上结果必然依然是反对称态。证明非常简单，不妨以反对称态的情况为例，假设 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_A$ ，即 $|\psi\rangle$ 满足 $P_g|\psi\rangle = \varepsilon(g)|\psi\rangle$ ，设 \mathcal{O} 在 $|\psi\rangle$ 上的作用结果为 $|\psi'\rangle$ ，即 $|\psi'\rangle = \mathcal{O}|\psi\rangle$ ，则由于(8.50)，我们有 $P_g|\psi'\rangle = P_g\mathcal{O}|\psi\rangle = \mathcal{O}P_g|\psi\rangle = \varepsilon(g)\mathcal{O}|\psi\rangle = \varepsilon(g)|\psi'\rangle$ ，可见 $|\psi'\rangle$ 依然是反对称态。我们说过，对称态描述的是全同玻色子，反对称态描述的是全同费米子，因此刚才的结果意味着，是玻色子还是费米子这是微观粒子的本质属性，任何物理过程和物理测量都无法改变这一属性。正是根据这种本质属性我们才可以将三维空间的微观粒子分成玻色子和费米子两大类。

(8.50)也意味着，置换操作不仅是 $3+1$ 维全同粒子体系的对称性，而是一种非常特殊的对称性。对于普通的对称变换来说，它只是不改变系统的动力学演化规律，也即是与时间演化算符对易，但与其它的物理量并不一定对易，因此一般来说，我们可以通过观测其它物理量的变化而观测到对称变换对系统的影响。但是，如果一个对称变换与所有的物理量都对易，那它的作用结果就是不可观测的，这样的对称性我们通常称之为规范对称性。这就是为什么我们说 $3+1$ 维全同粒子系统的置换对称性是一种规范对称性的原因。前面的章节中我们还碰到过另一个规范对称性的例子，即电荷守恒的 $U(1)$ 相位变换，而且我们也知道，电荷 $U(1)$ 相位变换同样也与所有的物理可观测量都对易。

8.4 *自旋统计定理

这一节我们依然统一讨论 $2+1$ 维情形和 $3+1$ 维情形。我们的目标是建

立两个全同粒子之间的基本编织操作和空间旋转操作之间的关系。一般来说，这两者之间并没有什么明确的关系，但是，在一种特殊的情形中，全同粒子编织和空间旋转的确密切相关，这种特殊情形允许我们将 $2+1$ 维全同阿贝尔任意子的编织与空间旋转等同起来，也允许我们建立 $3+1$ 维玻色-费米统计与粒子自旋之间的关系，所以叫自旋统计定理。

这种特殊情形其实非常简单，考虑一个荷为 a 的粒子在时空中的演化路径，如图(8.12)所示，图中左边的 a 粒子在某个时空局域上受到一个复杂的作用，使它在这个局域上“打了个圈”，虽然如此，局域性原理告诉我们，左边的态本质上依然是 a 粒子态，因此只能和右边的标准 a 粒子态相差一个相位 $e^{-i\theta_a}$ 。

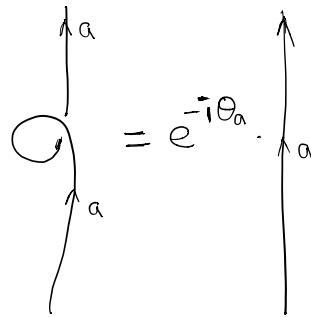


图 8.12: 左边的 a 粒子在某个时空局域上受到一个复杂的作用，使它在这个局域上“打了个圈”，虽然如此，局域性原理告诉我们，左边的态本质上依然是 a 粒子态，因此只能和右边的标准 a 粒子态相差一个相位 $e^{-i\theta_a}$ 。

另一方面，由于 a 粒子有内部自由度，所以我们不妨将它的时空路径画成一条带子，如图(8.13)所示。在这幅图中，我们把前面 a 粒子“打了个圈”的演化路径画成了一条时空带子，拉直这条带子就得到图(8.13)右边的那条带子，但是右边的这条带子显然是 a 粒子逆时针自转 2π 角的结果。这也即是说， a 粒子“打了个圈”所多出来的相因子应该刚好等于逆时针自转 2π 角的 $\exp(-2\pi i J_a/\hbar)$ ， J_a 是 a 粒子自旋角动量。结合这两段的结果我们就得到

$$e^{-i\theta_a} = \exp(-2\pi i J_a/\hbar). \quad (8.51)$$

现在只差一步我们就可以得到自旋-统计定理了，这一步涉及到对 $e^{-i\theta_a}$ 的解释。为此我们又得注意到图(8.12)和图(8.13)中 a 粒子“打了个

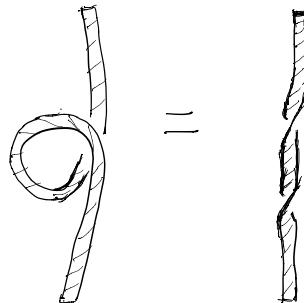


图 8.13: 左边的 a 粒子时空带子拉直后就变成右边的带子, 但是右边的带子显然等于 a 粒子逆时针自转 2π 角。

“圈”的演化路径其实非常奇特, 奇特之处就在于, 我们知道, 坚直向上方向是时间轴, 但是你看图(8.12)和图(8.13)中 a 粒子“打了个圈”的路径, 它有一部分是逆着时间走的。对于微观粒子来说, 这好像也没有什么问题, 因为对于微观世界而言, 时间正方向和负方向地位完全平等。但是, 对于我们宏观的观察者而言, 时间只能沿着正方向流逝, 为此我们就得重新解释图(8.12)中 a 粒子演化路径的逆时间部分。注意到电荷的运动方向与反电荷的反向运动方向对于产生电流来说完全一样, 因此我们可以将逆时间的那一部分 a 路径解释成 a 的反粒子 \bar{a} 在顺着时间方向走。如此一来, 我们就可以将图(8.12)中 a 粒子“打了个圈”的路径重新解释成(如图(8.14)所示): C 地有一个 a 粒子随着时间演化, 突然 A 地产生了一对正反 a 粒子, 其中正 a 粒子与 C 地运动过来的 a 粒子作了个逆时针编织, 之后, A 地产生的粒子对中的反 a 粒子与 C 地过来的 a 粒子在 B 地湮灭, 剩下一个 A 地粒子对中的正 a 粒子飞向未来。这样一分析我们就可以知道, 前面的相因子 $e^{-i\theta_a}$ 其实正好来源于两个 a 粒子的逆时针编织。如此一来, 方程(8.51)就将一类特殊的全同粒子编织与粒子自旋联系了起来, 因此可以称作自旋统计定理。

特别的, 如果 a 是 $2+1$ 维阿贝尔任意子, 那刚才的相因子 $e^{-i\theta_a}$ 必定是基本编织操作的阿贝尔表示, 方程(8.51)就把这个阿贝尔表示与 2 维空间的 2π 角旋转联系了起来。值得注意的是, 一般来说, 2 维空间的 2π 角旋转并不一定等于 1, 因此阿贝尔任意子可以有非平凡的 $e^{-i\theta_a}$ 。但是一般来说, 我们要求, 2 维空间虽然旋转一圈不等于恒等操作, 但是旋转 n 圈总可以等于恒等操作, 即要求对于某个 n , 有 $\exp(-n2\pi i J_a/\hbar) = 1$, 或者利用自旋-统计定理即有,

$$e^{-in\theta_a} = 1. \quad (8.52)$$



图 8.14: a 粒子对产生, 对湮灭, 以及编织。图中的箭头方向可以重新解释为荷的流动方向。

从而可见, 阿贝尔任意子的统计角 θ_a 其实是 2π 乘以一个分数, 所以又称之为分数统计。

进一步, 如果 a 是一个 $3 + 1$ 维的粒子, 那这时候空间旋转群就不是 2 维空间的 $SO(2)$ 群了, 而是 3 维空间的 $SO(3)$ 群。在前面的章节中我们系统研究过这种旋转群的表示, 我们发现, 它有两种不同的表示, 半整数表示和整数表示, 对于整数表示 $\exp(-2\pi i J_a/\hbar) = U(2\pi) = 1$, 对于半整数表示, $\exp(-2\pi i J_a/\hbar) = U(2\pi) = -1$ 。根据自旋-统计定理(8.51), 这就意味着, 对于整数自旋粒子, 必有 $e^{-i\theta_a} = 1$, 从而是玻色子, 而对于半整数自旋粒子, 则必有 $e^{-i\theta_a} = -1$, 从而是费米子。这就是通常量子场论中证明的自旋-统计定理。通常人们将这个定理概括成如下等式

$$U(2\pi) = (-)^F. \quad (8.53)$$

式中 $(-)^F$ 称为费米宇称算符, 它作用在费米量子态上为 -1 , 作用在玻色态上为 $+1$ 。

读者不妨回想一下前面章节中关于超对称的讨论, 我们知道 $U(2\pi)$ 与超对称荷 Q 反对易, 因此根据上面的自旋统计定理, 就有

$$(-)^F Q (-)^F = -Q. \quad (8.54)$$

这个结果就说明, 超对称荷 Q 是一个费米算符。

8.5 玻色子和费米子

本章前面几节我们利用全同粒子路径积分系统地讨论了 $2 + 1$ 维全同粒

子体系和 $3+1$ 维全同粒子体系。这些讨论除了本身能够导出一些神奇而重要的结论之外，它对于深入理解全同性原理也非常有帮助，然而，对于初学者来说，这些讨论可能有些过深。这一节我们将回到量子力学初学者的角度，直接讨论 $3+1$ 维时空中的全同性原理，讨论玻色子统计和费米子统计，对于已经学过并理解了前几节内容的读者，本节的内容基本上可以看成前几节的自然发展。不过，为了照顾到跳过了前几节的初学者，本节也会用简化的处理重复前几节的少量必要内容。

从某个角度上说， $3+1$ 维时空的全同粒子体系当然更为基本，因为我们的真实时空就是 $3+1$ 维的。即使对所谓的二维材料，它们其实也都有厚度，从微观上追究起来它们也都是由3维空间中的原子-分子-电子等等组成，其二维特性其实是一种“有效”描述，仅当我们不使用足够高的能量去探测它的微观结构时才成立。正因为如此，这一节和后面的第(8.6)节，我们将专门地研究这种真实的3维空间中的全同粒子体系。

8.5.1 多体希尔伯特空间

全同粒子量子力学当然属于多体量子力学，本书前面部分也涉及过多体量子力学，比如量子纠缠就不是单体量子现象，它至少要涉及到两个粒子或者说两体。但是我们还没有专门地强调过多体量子力学的一些特性，现在，让我们暂时忘记全同粒子，先看一下任何一个多体系的希尔伯特空间有何特性。

让我们从两体开始，假设一个量子系统由 A, B 两体组成， A, B 各自都可以有很复杂的内部结构，比方说各自本身可以是一个多体系统。假设单独对于 A 来说，其量子态的希尔伯特空间为 \mathcal{H}_A ，单独对于 B 来说，希尔伯特空间为 \mathcal{H}_B ，那么 A, B 作为一个整体其希尔伯特空间 \mathcal{H}_{AB} 是怎么样的呢？虽然我们前面没有一般性地讨论过这个问题，但是我们已经见过很多两体的例子，两个自由粒子，两个量子比特等等。仔细回想一下我们怎么处理这些例子，就能明白下面的回答是非常自然的。首先，我们分别取 \mathcal{H}_A 和 \mathcal{H}_B 各自的一组正交归一基 $\{|i_A\rangle\}, \{|i_B\rangle\}$ ，那么整个系统的任何量子态 $|\psi\rangle$ 都必定能写成如下的叠加形式，

$$|\psi\rangle = \sum_{i_A, i_B} \psi_{i_A, i_B} |i_A, i_B\rangle = \sum_{i_A, i_B} \psi_{i_A, i_B} |i_A\rangle |i_B\rangle. \quad (8.55)$$

式中 ψ_{i_A, i_B} 是叠加系数，所有这类量子态的集合就构成了整个系统的希尔伯特空间 \mathcal{H}_{AB} 。数学上，对于这样构造出来的希尔伯特空间有一个专门的名

称，称之为 \mathcal{H}_A 和 \mathcal{H}_B 的张量积，记为 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ ，因此

$$\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B. \quad (8.56)$$

值得说明的是，张量积是一个重要的数学概念，它的基本含义就是将两个东西并置在一起，在数学上它并不是必须按照(8.55)式来定义，实际上，在所谓的张量范畴论中，(8.55)式定义的张量积是一种“平凡”的张量积。但是在线性代数中以及我们的这本量子力学书中，我们只需关心这种“平凡”的张量积就足够了。之所以出现这种“平凡”的张量积，是因为我们的 A 、 B 两个子系统有某种局域性，也即是说，仅仅对 A 的某个物理量进行测量，和仅仅对 B 的某个物理量进行测量，两者之间不会有任何相互影响。

张量积的概念当然可以推广到一般的多体情形。假设 A, B, C, D, \dots 等多个子系统构成一个大量子系统，则这个大量子系统的希尔伯特空间就是各个子系统希尔伯特空间的张量积，可以记为 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_C \otimes \dots$ ，它是所有形如下式的量子态的集合

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{i_A, i_B, i_C, \dots} \psi_{i_A, i_B, i_C \dots} |i_A, i_B, i_C \dots\rangle \\ &= \sum_{i_A, i_B, i_C, \dots} \psi_{i_A, i_B, i_C \dots} |i_A\rangle |i_B\rangle |i_C\rangle \dots \end{aligned} \quad (8.57)$$

对于 N 个全同粒子的体系，由于这些粒子不可区分，所以描写单个粒子的正交归一基矢量对于所有粒子都应该一样，不妨记这样的正交归一基矢量为 $|u_i\rangle$ ，指标 $i = 1, 2, 3, \dots$ 用来区分不同的基矢量。为了描写整个多粒子态，我们需要将这些全同粒子进行标记，设分别标记为 $1, 2, 3, \dots, N$ 。当然，这样的标记是任意的，而且由于这些粒子严格不可区分，所以这些标记实际上也不是物理的，它仅仅是为了构造全同粒子量子态而引入的数学描述。作了这样的标记以后我们就可以将第 n 个粒子的正交归一基矢量记为 $|u_i(n)\rangle$ 。根据我们刚才的描述，整个 N 粒子体系的希尔伯特空间 \mathcal{H} 将是各粒子希尔伯特空间的张量积，它的基矢量可以取为 $|u_i(1), u_j(2), \dots, u_k(N)\rangle$ ，但是，正如我们将要看到的，这样的基矢量虽然可以直接描写非全同的多粒子体系，但却不能直接描写全同多粒子体系。实际上全同 N 粒子体系的希尔伯特空间将是 \mathcal{H} 的某个特定子空间，下面我们将要讨论如何构造这样的子空间。

8.5.2 置换对称性

两全同粒子情形

我们先来讨论两个全同粒子的情形。将这两个粒子标记为1, 2, 记相应的两粒子态希尔伯特空间为 \mathcal{H} , 根据前面的讨论, \mathcal{H} 的矢量基为 $|u_i(1), u_j(2)\rangle$ 。由于我们讨论的是两个全同粒子, 我们现在非物理地将这两个粒子分别标记为1, 2, 但实际在物理上, 1, 2是不可区分的, 这就意味着, 如果我们将这两个粒子相互置换一下, 在物理上系统将不会发生任何改变。这有两层含义, 第一, 置换前后系统的物理状态不会改变。第二, 这样的置换操作不会引起任何物理可观测量的改变。这两点实际上就意味着, 这样的置换操作是这两个全同粒子体系的一种特殊对称性。

我们定义两粒子的置换算符 P_{12} 如下,

$$P_{12}|u_i(1), u_j(2)\rangle = |u_i(2), u_j(1)\rangle = |u_j(1), u_i(2)\rangle, \quad (8.58)$$

上式的最后一个等号来源于习惯上我们常常将标记为第1个粒子的量子态写在狄拉克符号的第1个位置。读者可以验证, 这样定义的置换算符是一个么正算符, 即它保持态的内积不变。且对于希尔伯特空间 \mathcal{H} 里的任意量子态 $|\psi\rangle = \sum_{i,j} \psi_{i,j} |u_i(1), u_j(2)\rangle$, 我们有

$$P_{12}|\psi\rangle = \sum_{i,j} \psi_{i,j} |u_j(1), u_i(2)\rangle = \sum_{i,j} \psi_{j,i} |u_i(1), u_j(2)\rangle \quad (8.59)$$

上式的最后一个等号来自于求和指标的重命名。很显然, 置换算符对两粒子量子态的作用相当于将叠加系数 $\psi_{i,j}$ 的两个下标互换, 即 $\psi_{i,j} \rightarrow \psi_{j,i}$ 。很明显, 连续进行两次置换相当于不进行任何操作, 即有 $P_{12}^2 = 1$ 。

现在, 如果这两个粒子是两个全同粒子, 则由于置换操作不会改变系统的物理状态, 所以必有

$$P_{12}|\psi\rangle = e^{-i\varphi}|\psi\rangle, \quad (8.60)$$

即置换算符作用之后的量子态只能和原来的量子态相差一个相位。又由于 $P_{12}^2 = 1$, 从而有 $(e^{-i\varphi})^2 = 1$, 所以这个相位只有两种可能性, 要么取+1, 要么取-1。对于+1的情形, 我们就说这两个全同粒子为全同玻色子, 对于-1的情形, 我们就说这两个粒子为全同费米子。另外, 根据上一段的讨论我们又知道, 用量子态的展开系数来说, P_{12} 的作用相当

于 $P_{12} : \psi_{i,j} \rightarrow \psi_{j,i}$ 。因此对于全同玻色子，由于量子态在置换算符的作用下要保持不变，从而我们必有 $\psi_{i,j} = \psi_{j,i}$ ，而对于全同费米子则必有， $\psi_{j,i} = -\psi_{i,j}$ 。人们常常称这个结果为：全同玻色子的波函数必定为对称波函数，全同费米子的波函数必定为反对称波函数。

两粒子希尔伯特空间 \mathcal{H} 中，所有对称波函数所构成的希尔伯特子空间为全同玻色子的对称态空间，记为 \mathcal{H}_S ，而所有反对称波函数所构成的希尔伯特子空间为全同费米子的反对称态空间，记为 \mathcal{H}_A 。读者容易验证， \mathcal{H}_S 的基矢量可以取为

$$|u_i, u_j\rangle_S = |u_i(1), u_j(2)\rangle + |u_i(2), u_j(1)\rangle = (1 + P_{12})|u_i(1), u_j(2)\rangle. \quad (8.61)$$

这是因为， $|u_i, u_j\rangle_S$ 的任意线性叠加态 $\sum_{i,j} c_{i,j} |u_i, u_j\rangle_S = \sum_{i,j} c_{i,j} |u_i(1), u_j(2)\rangle + \sum_{i,j} c_{i,j} |u_i(2), u_j(1)\rangle = \sum_{i,j} (c_{i,j} + c_{j,i}) |u_i(1), u_j(2)\rangle$ ，很明显 $(c_{i,j} + c_{j,i}) = \psi_{i,j}$ 是一个对称波函数，因此在原来的希尔伯特空间 \mathcal{H} 中来看，这样的叠加态当然都是对称态。类似的，两全同费米子反对称态空间 \mathcal{H}_A 的基矢量可以取为

$$|u_i, u_j\rangle_A = (1 - P_{12})|u_i(1), u_j(2)\rangle. \quad (8.62)$$

关于两全同费米子的反对称态，有一个特别重要的情形值得单独考察。这情形就是，假如我们在公式(8.62)中令 $i = j$ ，很显然，结果必然是 $|u_i, u_i\rangle_A = 0$ 。也即是说，对于全同费米子系统，两个粒子不能处在同一个单粒子态上。这其实就是著名的泡利不相容原理。在前面的章节中我们讲过，正是因为有泡利不相容原理，我们才能正确地解释元素周期表。不仅如此，泡利不相容原理也是维持我们这个物质世界稳定性的根本原理之一，假如没有泡利不相容原理，那原子的核外电子都会占据到最低单电子能级上去，如此一来所有原子都会坍缩。两个费米子不能占据同一个单粒子态，这在效果上，就好像两个费米子之间有一个排斥力一样，对于大量全同费米子的系统，费米子之间的这种排斥力就称之为费米子的简并压。比方说，电子简并压正是使得白矮星能够抵抗自身的引力作用而稳定存在的原因，钱德拉塞卡甚至具体计算出，在恒星质量未超过1.44个太阳质量(钱德拉塞卡极限)时，电子简并压都能够阻止恒星在自身引力作用下的坍缩。

什么粒子是玻色子，什么粒子是费米子呢？关于这一点我们有所谓的自旋-统计定理。它告诉我们，整数自旋的粒子都是玻色子，而半整数自旋的粒子都是费米子。比方说光子的自旋是1，因此是玻色子，而电子的自

旋是 $1/2$ ，因此是费米子。同样，质子中子也是费米子，而所谓的“上帝粒子”Higgs玻色子，是一个标量粒子，自旋是零，因此是玻色子。

N 个全同粒子的情形

以上关于两全同粒子置换对称性的讨论当然可以推广到任意 N 个全同粒子情形，我们任意地将这 N 个全同粒子标记为 $1, 2, 3, \dots, N$ 。则对这 N 个粒子的置换就表现为对这 N 个数的置换，我们记在置换操作 g 的作用下，粒子 n 将被置换成粒子 $g(n)$ ，则 g 本身就唯一由其在 N 个粒子上的作用 $g : \{1, 2, 3, \dots, N\} \rightarrow \{g(1), g(2), \dots, g(N)\}$ 决定。最简单的置换操作当然就是恒等置换，也就是不做任何置换，可以把相应的 g 简单记为1。另外我们可以定义两个置换操作 g_1 和 g_2 的乘积 g_2g_1 为，先对 N 个粒子进行置换操作 g_1 ，之后再在 g_1 置换结果的基础上进行置换操作 g_2 ，很显然，按照这个置换乘法的定义， g_2g_1 仍然是一个置换操作。由此可见， N 个全同粒子的所有可能置换(包括恒等置换)的集合 S_N 在置换乘法下是封闭的。不仅如此，我们可以将任何置换过程逆转过来，从而得到任意置换操作 g 的逆操作 g^{-1} ，它满足 $g^{-1}g = gg^{-1} = 1$ 。也即是说， S_N 的每一个元素都可逆。满足这些性质的集合 S_N 就称之为一个群，元素 g 就是称作一个群元， S_N 就是 N 个粒子的置换群，由于 N 个粒子有 $N!$ 种置换，因此 S_N 共有 $N!$ 个群元。

置换操作中最简单的就是两粒子对换，通常记 i, j 两粒子的对换操作为 (ij) ，很明显任何对换都满足 $(ij)^2 = 1$ 。数学上不难证明， N 粒子的任意置换群元 g 均可以写成一系列的两两对换的乘积。如果 g 对应于偶数个对换相乘，我们就称 g 为偶置换，如果 g 对应于奇数个对换相乘，我们就称之为奇置换。很容易证明偶置换的逆依然是偶置换，奇置换的逆依然是奇置换，比方说偶置换 $g = (13)(12)$ 的逆 $g^{-1} = (12)(13)$ 显然依旧是偶置换。

对于 N 个全同粒子的系统，我们可以首先忽略其全同性，得到 N 个粒子的希尔伯特空间 \mathcal{H} ，其基矢量可以选为 $|u_{i_1}(1), u_{i_2}(2), \dots, u_{i_N}(N)\rangle$ ，式中 $|u_i\rangle$ 是单粒子希尔伯特空间的正交归一基矢量。仿照两粒子情形，我们可以将对 N 个粒子的置换算符 P_g 定义成

$$\begin{aligned} P_g |u_{i_1}(1), u_{i_2}(2), \dots, u_{i_N}(N)\rangle &= |u_{i_1}(g(1)), u_{i_2}(g(2)), \dots, u_{i_N}(g(N))\rangle \\ &= |u_{i_{g^{-1}(1)}}(1), u_{i_{g^{-1}(2)}}(2), \dots, u_{i_{g^{-1}(N)}}(N)\rangle. \end{aligned} \quad (8.63)$$

上式的最后一个等号是将多粒子态重新排列一下，使得第1个粒子的态排在狄拉克符号的第1个位置，以此类推。读者可以验证，这样定义出来的置换

算符必定是一个幺正算符，即必定保持态的内积不变。另外，根据上面的定义，读者很容易验证

$$\begin{aligned} & P_{g_2} P_{g_1} |u_{i_1}(1), u_{i_2}(2), \dots, u_{i_N}(N)\rangle \\ &= |u_{i_1}(g_2 g_1(1)), u_{i_2}(g_2 g_1(2)), \dots, u_{i_N}(g_2 g_1(N))\rangle \\ &= P_{g_2 g_1} |u_{i_1}(1), u_{i_2}(2), \dots, u_{i_N}(N)\rangle. \end{aligned} \quad (8.64)$$

也即是说，置换算符满足如下关系

$$P_{g_2} P_{g_1} = P_{g_2 g_1}. \quad (8.65)$$

这一代数关系的实质就在于，它告诉我们置换算符会保持置换操作的乘法关系，两个置换操作的乘积对应于两个相应置换算符的乘积。数学家称这种保持乘法关系的从置换群 S_N 到希尔伯特空间幺正算符的对应关系为置换群的幺正表示。也即是说，我们定义的置换算符刚好构成了相应置换群的幺正表示。

考虑到粒子的全同性，则有，置换算符的作用不会改变全同粒子系统的物理状态，即置换算符作用以后的量子态和原来的量子态只能相差一个相位。因此， N 个全同粒子的物理态空间不是 N 粒子希尔伯特空间 \mathcal{H} ，而是它的一个子空间，这个子空间的态额外满足下面的约束条件

$$P_g |\psi\rangle = e^{-i\varphi(g)} |\psi\rangle. \quad (8.66)$$

虽然我们现在考虑的是 N 个全同粒子，但是由于 P_g 得构成置换群的幺正表示，所以这个约束方程的解其实和两全同粒子类似，即只有两个不同的解。其中一个解描述全同玻色子，这时候对于任意 g ，恒有 $e^{-i\varphi(g)} = 1$ 。另一个解描述全同费米子，这时候 $e^{-i\varphi(g)} = \varepsilon(g)$ ，记号 $\varepsilon(g)$ 对于偶置换取 1，对于奇置换取 -1。这个一般性结论的证明其实并不难，关键点就在于要注意到：(1) 任意置换 g 总能写成一系列两粒子对换的乘积。(2) 由于 P_g 是置换群的表示，所以它也可以写成一系列两粒子对换算符的乘积。注意到这两点以后，人们就可以轻易地将 N 个全同粒子的分析约化为对两个全同粒子的分析，进而得出刚才所说的两个不同解。其中，玻色子的物理态空间称作对称态子空间，记为 \mathcal{H}_S ，费米子的物理态空间称作反对称态子空间，记作 \mathcal{H}_A 。

与两全同粒子类似，假如我们将 $|\psi\rangle$ 用基矢量 $|u_{i_1}(1), u_{i_2}(2), \dots, u_{i_N}(N)\rangle$ 展开成

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} \psi_{i_1, i_2, \dots, i_N} |u_{i_1}(1), u_{i_2}(2), \dots, u_{i_N}(N)\rangle. \quad (8.67)$$

则对于全同玻色子体系，叠加系数(波函数)将满足， $\psi_{i_1, i_2, \dots, i_N}$ 对于 N 个指标的任意置换都对称不变，这种波函数简称对称波函数，或者称为全对称波函数。而对于全同费米子体系， $\psi_{i_1, i_2, \dots, i_N}$ 对于任意两个指标的对换都反对称，比方说 $\psi_{i_2, i_1, \dots, i_N} = -\psi_{i_1, i_2, \dots, i_N}$ ，这种波函数称作反对称波函数，或者称作全反对称波函数。因此，对称态子空间 \mathcal{H}_S 其实就是所有对称波函数的空间，而反对称态子空间 \mathcal{H}_A 则是所有反对称波函数的子空间。

与两全同粒子情形类似，对称态空间 \mathcal{H}_S 的基矢量可以按照如下方法构造

$$|u_{i_1}, u_{i_2}, \dots, u_{i_N}\rangle_S = \sum_g P_g |u_{i_1}(1), u_{i_2}(2), \dots, u_{i_N}(N)\rangle. \quad (8.68)$$

证明其实非常简单，假如将某个置换算符 P_{g_1} 作用在这样的基矢量上，则由于 $P_{g_1} \sum_g P_g = \sum_g P_{g_1} P_g = \sum_g P_{g_1 g} = \sum_{g'} P_{g'}$ (最后一个等号是令 $g_1 g = g'$ ，并将对 g 的求和替换成对 g' 的求和)，因此我们将有

$$\begin{aligned} P_{g_1} |u_{i_1}, u_{i_2}, \dots, u_{i_N}\rangle_S &= P_{g_1} \sum_g P_g |u_{i_1}(1), u_{i_2}(2), \dots, u_{i_N}(N)\rangle \\ &= \sum_{g'} P_{g'} |u_{i_1}(1), u_{i_2}(2), \dots, u_{i_N}(N)\rangle = |u_{i_1}, u_{i_2}, \dots, u_{i_N}\rangle_S. \end{aligned} \quad (8.69)$$

这就证明了这样的基矢量在任何置换算符的作用下都保持不变，因此是对称态空间的基矢量。

而反对称态空间 \mathcal{H}_A 的基矢量的构造方法则是

$$|u_{i_1}, u_{i_2}, \dots, u_{i_N}\rangle_A = \sum_g \varepsilon(g) P_g |u_{i_1}(1), u_{i_2}(2), \dots, u_{i_N}(N)\rangle. \quad (8.70)$$

要证明它是反对称态空间的基矢量，只需要注意到根据置换的奇偶性， $\varepsilon(g)$ 满足如下关系

$$\varepsilon(g_2) \varepsilon(g_1) = \varepsilon(g_2 g_1), \quad \varepsilon(g^{-1}) = \varepsilon(g). \quad (8.71)$$

进而可以得出，

$$P_{g_1} \left(\sum_g \varepsilon(g) P_g \right) = \varepsilon(g_1) \left(\sum_{g'} \varepsilon(g') P_{g'} \right), \quad (8.72)$$

具体的证明细节我们留给读者自己练习。

全同费米子体系反对称态基矢量的构建公式(8.70)还可以写成一种更常见的行列式形式

$$\begin{aligned}
 |u_{i_1}, u_{i_2}, \dots, u_{i_N}\rangle_A &= \sum_g \varepsilon(g) |u_{i_1}(g(1)), u_{i_2}(g(2)), \dots, u_{i_N}(g(N))\rangle. \\
 &= \sum_g \varepsilon(g) |u_{i_1}(g(1))\rangle |u_{i_2}(g(2))\rangle \dots |u_{i_N}(g(N))\rangle. \\
 &= \det \begin{pmatrix} |u_{i_1}(1)\rangle & |u_{i_1}(2)\rangle & \dots & |u_{i_1}(N)\rangle \\ |u_{i_2}(1)\rangle & |u_{i_2}(2)\rangle & \dots & |u_{i_2}(N)\rangle \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ |u_{i_N}(1)\rangle & |u_{i_N}(2)\rangle & \dots & |u_{i_N}(N)\rangle \end{pmatrix} \quad (8.73)
 \end{aligned}$$

在最后的行列式中，我们看到，每个单粒子态相当于行列式的一行，每个被标记的粒子相当于行列式的一列。很明显，将任意两个粒子对换相当于交换行列式的两列，因此当然是反对称的。这就再一次证明了，最终的行列式的确能构成反对称态空间的基矢量。另外，从最终的行列式中还可以轻易看出另一个重要结果，即一个单粒子态上不可能出现两个或两个以上的全同费米子，否则的话，这个行列式就会有两行或者更多行是完全一样的，而线性代数的知识告诉我们，这样的行列式必定为零，从而这种情况在物理上不可能出现。这个结果就是我们前面提到过的泡利不相容原理。

对于全同粒子体系，置换算符的作用不仅不能改变系统的物理状态，而且置换算符的作用效果应该是无法观测的，因为对于全同粒子体系而言，将粒子作一个任意置换对于物理结果不应该有任何影响。这就意味着，置换算符必须得和任意物理可观测量 \mathcal{O} 均对易，即

$$P_g \mathcal{O} = \mathcal{O} P_g. \quad (8.74)$$

特别的，置换算符得和全同粒子哈密顿量对易。从而置换操作是全同粒子体系的一种特殊对称性。而且，由于置换算符与全同粒子哈密顿量对易，因此它当然也和时间演化算符 $U(t_f, t_i)$ 对易，即

$$P_g U(t_f, t_i) = U(t_f, t_i) P_g. \quad (8.75)$$

在实际应用中，我们总是反过来应用公式(8.74)的，即我们总是将它看成是对全同粒子物理可观测量的一个约束，只有满足这个约束的量才可能是可观测量。比方说，根据这个约束， N 个全同粒子体系的位置算符 $\mathbf{X}_1 + \mathbf{X}_2 + \dots + \mathbf{X}_N$ 是可观测的，但是， \mathbf{X}_1 是无法观测的。

与时间演化算符分析方法的关系

这一个小节我们主要想解决两个问题：第一，以两全同费米子的散射为例，分析全同粒子体系散射问题的特殊性。第二，将本节着重强调的置换算符和置换对称性分析方法与本章前几节中的时间演化算符和路径积分分析方法联系起来。

假设两全同费米子的散射初态为 $|u_{i_1}, u_{i_2}\rangle_A$ 态，根据前面的构造方法，

$$|u_{i_1}, u_{i_2}\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - P_{12})|u_{i_1}(1), u_{i_2}(2)\rangle, \quad (8.76)$$

式中 $\frac{1}{\sqrt{2}}$ 为归一化因子。类似的，假设两全同费米子的散射末态为 $|v_{f_1}, v_{f_2}\rangle_A$ 态，其构造为

$$|v_{f_1}, v_{f_2}\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - P_{12})|v_{f_1}(1), v_{f_2}(2)\rangle. \quad (8.77)$$

则两全同费米子的散射概率幅相应于时间演化算符的如下矩阵元

$${}_A\langle v_{f_1}, v_{f_2}|U(t_f, t_i)|u_{i_1}, u_{i_2}\rangle_A. \quad (8.78)$$

代入散射初态和散射末态的具体构造，我们就可以得到

$$\begin{aligned} & {}_A\langle v_{f_1}, v_{f_2}|U(t_f, t_i)|u_{i_1}, u_{i_2}\rangle_A \\ &= \frac{1}{2}\langle v_{f_1}(1), v_{f_2}(2)|(1 - P_{12}^\dagger)U(t_f, t_i)(1 - P_{12})|u_{i_1}(1), u_{i_2}(2)\rangle \end{aligned} \quad (8.79)$$

注意到 P_{12} 与 $U(t_f, t_i)$ 对易，再进一步利用 $P_{12}^\dagger = P_{12}^{-1} = P_{12}$ (首先由于 P_{12} 为幺正算符，所以 $P_{12}^\dagger = P_{12}^{-1}$ ，又由于 $P_{12}^2 = 1$ ，所以 $P_{12}^{-1} = P_{12}$)。我们很轻易就能推导出(8.79)等式右边的表达式等价于

$$\begin{aligned} & \langle v_{f_1}(1), v_{f_2}(2)|U(t_f, t_i)|u_{i_1}(1), u_{i_2}(2)\rangle \\ & - \langle v_{f_1}(1), v_{f_2}(2)|P_{12}^\dagger U(t_f, t_i)|u_{i_1}(1), u_{i_2}(2)\rangle \\ &= \langle v_{f_1}(1), v_{f_2}(2)|U(t_f, t_i)|u_{i_1}(1), u_{i_2}(2)\rangle \\ & - \langle v_{f_2}(1), v_{f_1}(2)|U(t_f, t_i)|u_{i_1}(1), u_{i_2}(2)\rangle. \end{aligned} \quad (8.80)$$

这就是两全同费米子散射幅的最终表达式，这个表达式有非常简单的解释，它的两项分别对应于(8.15)中的左图和右图。如果我们考察的是两个全同玻色子的散射，那推导过程是完全类似的，只不过这时候，两幅图对应的

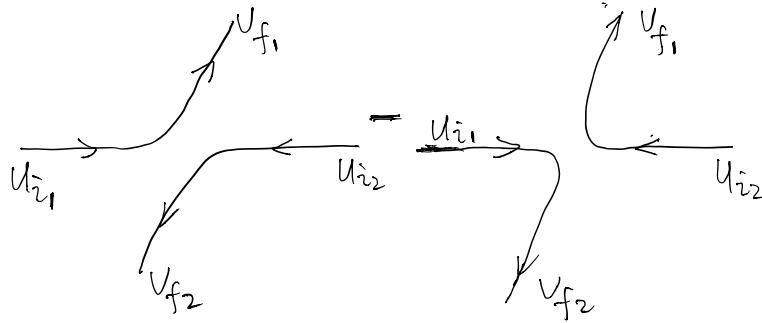


图 8.15: 两全同费米子散射, 左图相应于散射幅 $\langle v_{f1}(1), v_{f2}(2) | U(t_f, t_i) | u_{i1}(1), u_{i2}(2) \rangle$, 右图相应于散射幅 $\langle v_{f2}(1), v_{f1}(2) | U(t_f, t_i) | u_{i1}(1), u_{i2}(2) \rangle$.

散射幅应该是相加而不是相减。至此为止, 实际上我们就完全解决了本章一开始提出来的问题。

总之, 对于两全同费米子的散射幅, 我们有

$$\begin{aligned}
 & {}_A \langle v_{f1}, v_{f2} | U(t_f, t_i) | u_{i1}, u_{i2} \rangle_A \\
 &= \langle v_{f1}(1), v_{f2}(2) | U(t_f, t_i) | u_{i1}(1), u_{i2}(2) \rangle \\
 &\quad - \langle v_{f2}(1), v_{f1}(2) | U(t_f, t_i) | u_{i1}(1), u_{i2}(2) \rangle. \tag{8.81}
 \end{aligned}$$

对于全同玻色子情形, 则应该将反对称态改为对称态, 相应的公式右边的两项应该是相加而不是相减。但是, 前面的图(8.15)画的是粒子的运动空间轨道图, 如果我们画出粒子完整的时空路径图, 那散射幅 ${}_A \langle v_{f1}, v_{f2} | U(t_f, t_i) | u_{i1}, u_{i2} \rangle_A$ 就应该示意性地表示为图(8.16)。阅读了本章前几节的读者一定已经发现, 这个结果和我们前面用路径积分方法推导出来的结果完全一致。

8.5.3 应用举例

$\nu = 1$ 的整数量子霍尔效应基态波函数

在第四章中我们研究过朗道能级以及相应的量子霍尔效应。在那里我们看到, 电子最低朗道能级的单粒子态为

$$u_i(w, \bar{w}) = w^i e^{-\frac{|w|^2}{4l_B^2}}, \tag{8.82}$$

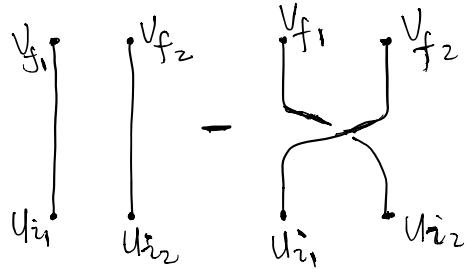


图 8.16: 左图相应于散射幅 $\langle v_{f_1}(1), v_{f_2}(2) | U(t_f, t_i) | u_{i_1}(1), u_{i_2}(2) \rangle$, 右图相应于散射幅 $\langle v_{f_2}(1), v_{f_1}(2) | U(t_f, t_i) | u_{i_1}(1), u_{i_2}(2) \rangle$ 。竖直方向为时间轴。

式中 $w = x + iy$ 为两维平面的复坐标。当然这是一个 $2 + 1$ 维的系统, 但是对于电子系统而言, 它在 $2 + 1$ 维所满足的统计和 $3 + 1$ 维是一样的, 都是全同费米子统计。因此对于填满最低朗道能级的 $N_\Phi = \frac{eBS}{2\pi\hbar}$ 个电子而言, 它们的多体波函数必须是一个全反对称波函数, 而且 N_Φ 个电子填充到 N_Φ 个态上, 填充方法是唯一的, 因此相应的反对称态基矢量也是唯一的, 由下面的行列式给出(式中 $N = N_\Phi$)

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = \det \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ w_1 & w_2 & \dots & w_N \\ w_1^2 & w_2^2 & \dots & w_N^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ w_1^{N-1} & w_2^{N-1} & \dots & w_N^{N-1} \end{pmatrix} \prod_{n=1}^N e^{-\frac{|w_n|^2}{4t_B^2}}. \quad (8.83)$$

这个行列式就是著名的范德蒙行列式, 利用范德蒙行列式的标准计算结果, 我们可以将上面的多体波函数重新表达成

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = \prod_{1 \leq n < m \leq N} (w_n - w_m) \prod_{n=1}^N e^{-\frac{|w_n|^2}{4t_B^2}}. \quad (8.84)$$

显然, 这个波函数在任意两个电子位置坐标的置换下都反对称。因而的确符合全同费米子波函数的要求。这个波函数就是填充分数 $\nu = 1$ 的整数量子霍尔效应的基态波函数。不仅如此, Laughlin 正是通过推广这个整数量子霍尔效应波函数, 从而给出了分数量子霍尔效应的一个理论解释。

单费米子近似

下面我们考察一个特殊的 N 个全同费米子的系统，假设这些费米子之间没有相互作用，因此整个系统的哈密顿量 H 可以写成

$$H = h(1) + h(2) + \dots + h(N). \quad (8.85)$$

式中 $h(n)$ 表示第 n 个费米子的哈密顿量，并且所有的 $h(n)$ 形式都一样，因此 H 与任意置换算符 P_g 均对易。

为了构造这个系统的态空间，我们可以首先考察单粒子态，设单粒子哈密顿量 h 的本征方程为

$$h|u_i\rangle = e_i|u_i\rangle, \quad (8.86)$$

式中 e_i 为单粒子能量本征值，不妨设 $e_1 < e_2 < \dots < e_N < e_{N+1} < \dots$ 。由于粒子间没有相互作用，则现在多体量子态的问题就转换为将 N 个全同费米子填充进这些单粒子能级的问题。由于泡利不相容原理，每个费米子要占据一个不同的能级。显然，总能量最低的情况是，前 N 个单粒子能级被占据，系统的总能量为 $E_g = e_1 + e_2 + \dots + e_N$ 。这就构成了整个系统的基态，其波函数是

$$|u_1, u_2, \dots, u_N\rangle_A = \sum_g \varepsilon(g) |u_1(g(1)), u_2(g(2)), \dots, u_N(g(N))\rangle. \quad (8.87)$$

全同费米子系统基态所对应的最高被占据单粒子能级就称作费米能级，在这里费米能级就是 e_N 。

但是，如果我们考察的是全同玻色子体系，那情况将完全不同，这时候没有泡利不相容原理，所以 N 个全同玻色子可以全都占据最低单粒子能级 e_1 ，这就叫玻色-爱因斯坦凝聚。它告诉我们，当温度足够低时，玻色子气体可以全都凝聚到最低单粒子能级上去。

空间波函数与自旋波函数分离的情形

对于有些全同费米子系统，它的空间动力学变量和自旋变量之间没有耦合，简称没有自旋-轨道耦合。那这时候总的多体波函数就可以分离变量成空间波函数与自旋波函数的乘积。对于这种情况的全同费米子系统，由于全同性原理只要求总波函数是反对称波函数，所以我们既可以要求空间波函数对称而自旋波函数反对称，也可以要求空间波函数反对称而自旋波函数对称，这两种情况的总波函数均反对称，从而都可以满足全同性原理的要求。

比方说，对于一个类氢离子，其核外有两个电子（全同费米子），均处于 $n = 1, l = m = 0$ 的最低单粒子能级 $|\psi_{100}\rangle$ ，因此，系统的空间波函数必定是对称的 $|\psi_{100}, \psi_{100}\rangle$ ，从而这两个电子的自旋波函数必定反对称，也就是必定处于自旋单态 $(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ ，从而系统的总波函数必定为

$$|\psi_{100}, \psi_{100}\rangle (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}. \quad (8.88)$$

8.6 *产生湮灭算符与全同粒子量子力学

前面我们描述全同 N 粒子系统时，我们是先把这 N 个粒子标记为 $1, 2, \dots, N$ 再来处理的。这当然是一种表示 N 粒子置换对称性的方法，通过这种方法我们可以把全同粒子希尔伯特空间构建为 N 粒子希尔伯特空间 \mathcal{H} 的子空间。相应的全同粒子体系的物理可观测量也可以表示为通常的 N 粒子体系的算符。这样的处理方式当然能够解决问题，但却不是最好的描述全同粒子体系的方式。这一节我们将看到，有一个巧妙的代数方法可以很方便地表示全同玻色子体系或者全同费米子体系的置换对称性，从而直接了当地建立它们的物理态空间和可观测量算符。顺便提一下，由于历史的原因，这种代数方法有一个很夸张的名称，称之为二次量子化。二次量子化方法当然没有其名字所暗示的那么夸张的物理内涵，它并不意味着我们要建立一个量子力学的量子力学，实际上量子力学只有一个，二次量子化方法只是一种描述全同粒子体系量子力学的巧妙代数方法而已，它的一部分重要性在于，它可以自然地将我们引导向量子场论。

为了说清楚这种代数方法，我们首先引入一些记号，我们将单粒子正交归一基矢量 $|u_i\rangle$ 简记为 $|i\rangle$ ，即 $|i\rangle = |u_i\rangle$ 。从而全同玻色子的对称态基矢量可以重记为 $|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle_S = |u_{i_1}, u_{i_2}, \dots, u_{i_N}\rangle_S$ ，它在任意一对指标交换下均保持对称不变。而全同费米子的反对称态基矢量可以重记为 $|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle_A = |u_{i_1}, u_{i_2}, \dots, u_{i_N}\rangle_A$ ，它在任意一对指标交换下均要出一个负号，从而反对称。我们将这两种情况统一在一起，记作 $|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle_\zeta$ ， ζ 仅有两个取值 ± 1 ， $\zeta = 1$ 对应全同玻色子体系的对称态， $\zeta = -1$ 对应全同费米子体系的反对称态。

二次量子化方法中的多粒子态

二次量子化这种代数方法的关键点在于将不同粒子数目的全同粒子体系放在一起（也就是放在同一个希尔伯特空间里）来考察，这也是它能自

然引导向量子场论的关键，因为在量子场论中粒子可以产生和湮灭，其数目通常无法固定。这个包含不同粒子数的希尔伯特空间通常称作Fock 空间，记为 \mathcal{F} 。

为了建立Fock 空间，首先我们定义0个全同粒子对应 \mathcal{F} 里的一个量子态 $|0\rangle$ ，称作真空态(注意它不是量子比特里的 $|0\rangle$ 态)。下面我们引入关键的定义，我们定义单粒子态 $|i\rangle$ 为某个算符 a_i^\dagger 作用在 $|0\rangle$ 态上产生的，即

$$a_i^\dagger |0\rangle = |i\rangle. \quad (8.89)$$

同理可以定义多粒子态，比如2粒子态 $|i_1, i_2\rangle_\zeta$ 和3粒子态 $|i_1, i_2, i_3\rangle_\zeta$ 可以简单定义如下

$$\begin{aligned} |i_1, i_2\rangle_\zeta &= a_{i_1}^\dagger a_{i_2}^\dagger |0\rangle, \\ |i_1, i_2, i_3\rangle_\zeta &= a_{i_1}^\dagger a_{i_2}^\dagger a_{i_3}^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \quad (8.90)$$

另一方面，根据对称态和反对称态的定义我们又有

$$|i_1, i_2\rangle_\zeta = \zeta |i_2, i_1\rangle_\zeta = \zeta a_{i_2}^\dagger a_{i_1}^\dagger |0\rangle. \quad (8.91)$$

由此可见，要让我们构造出来的多粒子态自动是对称态或者反对称态，我们只需令算符 a_i^\dagger 满足如下代数关系

$$a_{i_1}^\dagger a_{i_2}^\dagger = \zeta a_{i_2}^\dagger a_{i_1}^\dagger, \quad (8.92)$$

$\zeta = 1$ 的情形我们称相应的算符为玻色算符，它对应于两个 a^\dagger 算符对易， $\zeta = -1$ 的情形我们称相应的算符为费米算符，它对应于两个 a^\dagger 算符反对易。因此通过令算符对易或者反对易，(8.92)这个简单的代数办法就解决了全同粒子体系物理态的对称或反对称问题。

特别的，(8.92)式这个代数关系告诉我们，对于全同费米子体系 $(a_i^\dagger)^2 = -(a_i^\dagger)^2 = 0$ ，这其实就对应 $|i, i\rangle_A = 0$ ，这也就是泡利不相容原理。

从前面的定义我们可以很清楚地看到， a_i^\dagger 算符的作用会将全同粒子的数目增加1，或者说 a_i^\dagger 的物理含义就是产生一个 $|i\rangle$ 态的粒子，所以称作产生算符。当然，按照厄密共轭算符的定义， a_i^\dagger 的厄密共轭算符 a_i 的作用就会将全同粒子数目减少1，具体来说， a_i 会湮灭一个原本占据在 $|i\rangle$ 态上的粒子，故称作湮灭算符。很快读者就可以看到，这里的产生-湮灭算符和我们在前面的章节中求解线性谐振子时引入的产生-湮灭算符在数学上是一回事，但是物理解释有所不同，这里我们处理的是多粒子量子力学，产生或

湮灭的是一个粒子，而在求解线性谐振子时产生或湮灭的是一个能级量子数。

和线性谐振子的这种类比启发我们按如下方法建立Fock空间的一组基矢量。我们要解决的问题就是如何更方便地标记多个全同粒子的量子态，或者说如何编码多粒子态。前面我们采用的方法是先把粒子标记为 $1, 2, \dots, N$ ，然后按照粒子的顺序将多粒子态编码成 $|u_{i_1}(1), u_{i_2}(2), \dots\rangle$ 的形式，最后再要求对于全同粒子最终的物理态得全对称或者全反对称。现在我们作一个关键的改变，我们换成按照单粒子态的某个排列顺序编码多粒子态，也即是说，我们将单粒子态指标*i*排列成 $1, 2, 3, \dots$ 的顺序，然后依次看第1个态上占据了多少个全同粒子，第2个态上又占据了多少个全同粒子，依此类推。也就是说，我们将多粒子态编码成 $|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$ 这一串非负整数，其中 n_i 表示*i*态上占据的全同粒子数目，称作*i*态上的占据数。

知道了单粒子态的占据情况，再加上交换两个粒子时对称或者反对称的要求，实际上就唯一确定了多个全同粒子的量子态，所以我们可以唯一性地把全同多粒子态编码成 $|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$ 的形式，这就是Fock空间的一组自然基矢量，相应的表象称作占据数表象。特别的，对于 $\zeta = -1$ 的全同费米子情形，由于泡利不相容原理，一个单粒子态上不能有两个或两个以上全同费米子占据，所以这时候， n_i 只有0或1这两种取值，即 $n_i = 0, 1$ 。当然，对于全同玻色子体系， n_i 取多少没有什么限制，只要大于等于0就可以了。

由于 a_i^\dagger 是在单粒子态*i*上产生一个粒子， a_i 是将*i*态上原本占据的一个粒子湮灭掉，所以很显然我们将有

$$\begin{aligned} a_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &\propto |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \\ a_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &\propto |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (8.93)$$

在上面的式子中，所有的占据数都应该大于等于0，如果某个占据数小于0，则相应的表达式本身为0。对于全同费米子体系，占据数还应该小于等于1，如果某个占据数大于1，则相应的表达式本身也为0。

类比于线性谐振子问题，我们可以知道，占据数 n_i 应该是算符 $\hat{n}_i = a_i^\dagger a_i$ 的本征值。由此类比于线性谐振子问题，我们可以知道

$$\begin{aligned} a_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} \zeta^{s_i} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \\ a_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i} \zeta^{s_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (8.94)$$

对于玻色算符情形，这就是线性谐振子问题中告诉我们的标准的产生-湮灭算符作用关系。对于费米算符情形，这个公式多了一个因子 ζ^{s_i} ，这里 $s_i = \sum_{j=1}^{i-1} n_j$ ，为*i*态前面的*i*-1个态上的总占据数。多出这个因子其实很好理解，因为这时候 a_i 或者 a_i^\dagger 要正确地作用在*i*态上，它必须先和*i*前面的 s_i 个产生算符相交换，对于费米算符，每一次交换出一个因子 ζ ，最后多出来的因子就是 ζ^{s_i} 。

利用代数关系式(8.94)，我们容易推导如下产生湮灭算符之间应该满足的标准代数关系式

$$[a_i, a_j^\dagger]_\zeta = \delta_{ij}, \quad [a_i^\dagger, a_j^\dagger]_\zeta = 0, \quad [a_i, a_j]_\zeta = 0. \quad (8.95)$$

这里 $[A, B]_\zeta = AB - \zeta BA$ ，即对于玻色算符它是普通的对易子，但是对于费米算符，它其实是反对易子。(8.95)式的后两个等式没有任何新东西，它们显然就是将(8.92)式重写一下。但(8.95)式的第一等式是相当非平凡的，特别的，对于全同费米子情形，它告诉我们

$$a_i a_i^\dagger + a_i^\dagger a_i = 1. \quad (8.96)$$

这就是费米子产生湮灭算符所满足的反对易关系，它和玻色子的对易关系 $a_i a_i^\dagger - a_i^\dagger a_i = 1$ 有本质区别。

二次量子化方法中的算符

如此一来，利用产生-湮灭算子的对易或反对易性质我们就表示了全同玻色子或全同费米子的置换对称性，并且还建立了全同粒子体系的Fock 空间。下面我们来讨论如何用产生-湮灭算子表示全同粒子体系的物理量算符。

首先我们来看单体算符，即不涉及多体相互作用的算符。这样的算符比方有动能算符等等。为简单起见，假设某个这样的单体算符 \mathcal{O}_1 在单粒子希尔伯特空间中对应于算符 \hat{o} ，假设在矢量基 $|i\rangle = |u_i\rangle$ 中 \hat{o} 是对角化的，本征值为 o_i ，很明显 $o_i = \langle i | \hat{o} | i \rangle$ 。则在全同粒子的多体希尔伯特空间中， \mathcal{O}_1 的总本征值为每个粒子的本征值之和，也即是说，在Fock空间矢量基 $|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$ 中， \mathcal{O}_1 的本征值为

$$\sum_i o_i n_i. \quad (8.97)$$

显然, 为了得到这样的本征值, 我们只需将 \mathcal{O}_1 表示成如下算符

$$\mathcal{O}_1 = \sum_i o_i \hat{n}_i = \sum_i \langle i | \hat{o} | i \rangle a_i^\dagger a_i. \quad (8.98)$$

为了得到 \mathcal{O}_1 在任意单粒子矢量基中的表达式, 我们利用单粒子希尔伯特空间的基矢变换 $|i\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha | i \rangle$, 并定义 $a_\alpha^\dagger |0\rangle = |\alpha\rangle$, $a_i^\dagger |0\rangle = |i\rangle$, 从而容易有

$$a_i^\dagger = \sum_\alpha a_\alpha^\dagger \langle \alpha | i \rangle, \quad a_i = \sum_\alpha \langle i | \alpha \rangle a_\alpha. \quad (8.99)$$

利用这样的基矢变换, 我们就能将(8.98)式变换到任意单粒子矢量基中, 从而有

$$\mathcal{O}_1 = \sum_{\alpha, \beta} \langle \alpha | \hat{o} | \beta \rangle a_\alpha^\dagger a_\beta. \quad (8.100)$$

特别的, 我们有总粒子数算符 $N = \sum_i a_i^\dagger a_i = \sum_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha$ 。这是最简单的单体算符, 其本征值 $\sum_i n_i$ 为系统的总粒子数目。很容易验证的是, 以上的任何单体算符都与粒子数算符 N 对易, 即 $[N, \mathcal{O}_1] = 0$ 。

下面我们来看两体相互作用算符 \mathcal{O}_2 。假设它在两体希尔伯特空间相应于算符 \hat{v} , 假设 \hat{v} 在两体矢量基 $|i, j\rangle$ 上的本征值为 v_{ij} , 即 $\hat{v}|i, j\rangle = v_{ij}|i, j\rangle$, 很容易验证, 这里无论 $|i, j\rangle$ 态是对称态还是反对称态, v_{ij} 关于指标 i, j 均是对称的。则在多粒子希尔伯特空间矢量基 $|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$ 中, 两体算符 \mathcal{O}_2 的总本征值为所有可能两体本征值的和, 即为

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij} n_i n_j + \frac{1}{2} \sum_i v_{ii} n_i (n_i - 1), \quad (8.101)$$

式中第1项来自两个不同单粒子态上的粒子相互作用, 其中因子 $1/2$ 是因为 i, j 相互作用和 j, i 相互作用是一样的。式中第2项来自两个相同单粒子态上的粒子相互作用。很容易看出来, 上式的结果也可以重写成

$$\frac{1}{2} \sum_{ij} v_{ij} (n_i n_j - n_i \delta_{ij}). \quad (8.102)$$

式中 $n_i n_j - n_i \delta_{ij}$ 是如下算符的本征值

$$\begin{aligned} a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j - a_i^\dagger a_i \delta_{ij} &= a_i^\dagger (\delta_{ij} + \zeta a_j^\dagger a_i) a_j - a_i^\dagger a_i \delta_{ij} \\ &= \zeta a_i^\dagger a_j^\dagger a_i a_j = a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i. \end{aligned} \quad (8.103)$$

所以为了在Fock空间上取到本征值(8.102)，我们只需将两体算符 \mathcal{O}_2 取成

$$\mathcal{O}_2 = \frac{1}{2} \sum_{ij} v_{ij} a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i. \quad (8.104)$$

注意到 $v_{ij} = \langle i, j | \hat{v} | i, j \rangle$ ，从而可以进一步将上式变换到任意单粒子矢量基中，得到

$$\mathcal{O}_2 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | \hat{v} | \gamma\delta \rangle a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma. \quad (8.105)$$

值得一提的是，人们很容易验证，任何以上形式的两体算符都和粒子数算符 $N = \sum_i a_i^\dagger a_i$ 对易，即有 $[N, \mathcal{O}_2] = 0$ 。

二次量子化与场

下面假设我们忽略粒子自旋，考察单粒子希尔伯特空间的一组特殊矢量基，即坐标表象 $|\mathbf{x}\rangle$ ，即在上文中取 $i = \mathbf{x}$ ，相应的 $a_i = a_{\mathbf{x}}$ 现在我们记作 $a(\mathbf{x})$ ，对 i 的求和就变成了对 \mathbf{x} 的积分，克隆内克符号 δ_{ij} 就变成了狄拉克 δ 函数。因此，(8.95)式现在应该是

$$[a(\mathbf{x}), a^\dagger(\mathbf{x}')]_\zeta = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (8.106)$$

很显然，粒子数算符 N 现在应该是

$$N = \int d^3 \mathbf{x} a^\dagger(\mathbf{x}) a(\mathbf{x}). \quad (8.107)$$

单粒子的能量算符 \hat{h} 现在应该是 $\hat{h} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$ ， $V(\mathbf{x})$ 为粒子受到的外势场作用，代入单体算符 \mathcal{O}_1 的公式(8.100)，我们就能得到单体的哈密顿量

$$H_0 = \int d^3 \mathbf{x} a^\dagger(\mathbf{x}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right] a(\mathbf{x}). \quad (8.108)$$

类似的，对于两体相互作用算符，注意到 i, j 应该分别替换成 \mathbf{x}, \mathbf{x}' ，从而前面的 v_{ij} 可以替换成相互作用势能 $v_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'}$ ，这里记为 $V(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ ，进而可以将两体相互作用算符(8.104)写成

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int d^3 \mathbf{x} \int d^3 \mathbf{x}' a^\dagger(\mathbf{x}) a^\dagger(\mathbf{x}') V(\mathbf{x}, \mathbf{x}') a(\mathbf{x}') a(\mathbf{x}). \quad (8.109)$$

假设仅仅只有这种两体相互作用，那么全同粒子体系完整的哈密顿量就应该是 $H = H_0 + \hat{V}$ 。前面我们说过，粒子数算符 N 与 H_0 和 \hat{V} 均对易，因此， $[N, H] = 0$ 。这说明这样的全同粒子体系总粒子数是守恒的，我们可以限制在一个确定粒子数目 N 的子空间里来讨论问题。

以上这些关于坐标表象的讨论很容易推广到包括粒子自旋的情形，相应的推广我们留给读者。坐标表象的讨论自然将我们引导向一个结论，即我们可以将 $a(\mathbf{x})$ 和 $a^\dagger(\mathbf{x})$ 看成是空间分布的场，如此一来，上面关于坐标表象二次量子化方法的讨论就可以自然看成是某种量子场论。

Hubbard 模型

二次量子化方法应用非常广泛，比方说，在凝聚态物理中有大量的模型都是用二次量子化方法表述的。下面我们简单介绍一下这些模型中也许最著名的一个，即所谓的Hubbard 模型。

我们的任务是要描述一个电子系统(费米子)，只不过这个电子系统在一个晶格上运动。电子的单粒子态主要由电子所处的晶格位置描述，比如电子处在第 i 个格点，那就标记为 $|i\rangle$ 态，当然电子还有自旋，标记为可以取两个不同值的指标 σ ，即 $\sigma = \uparrow, \downarrow$ 。所以，我们用费米产生-湮灭算符 $a_{i\sigma}, a_{i\sigma}^\dagger$ 来描述这些电子，不过，文献中习惯将电子的产生-湮灭算符记为 $c_{i\sigma}, c_{i\sigma}^\dagger$ 。

假设单个电子在 $|i\rangle, |j\rangle$ 格点状态之间的哈密顿矩阵元为 $\langle i|\hat{h}|j\rangle$ ，假设两体相互作用的矩阵元为 $\langle lm|V|pn\rangle$ ，式中 l, m, p, n 均为格点位置。则根据我们在本节前面几个小节的论述可以知道，整个全同电子系统的哈密顿算符可以写成

$$H = \sum_{i,j,\sigma} \langle i|\hat{h}|j\rangle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{lmnp,\sigma,\sigma'} \langle lm|V|pn\rangle c_{l\sigma}^\dagger c_{m\sigma'}^\dagger c_{n\sigma'} c_{p\sigma}. \quad (8.110)$$

Hubbard 模型就是对上面这个哈密顿量(8.110)的进一步简化。为了完成这样的简化，我们得进一步假定：(1). 电子处在当前格点时本身具有能量 ϵ ，即 $\langle i|\hat{h}|i\rangle = \epsilon$ 。(2). 电子隧穿到相邻格点上的能量矩阵元为 $-t$ 。即当 i, j 相邻时， $\langle i|\hat{h}|j\rangle = -t$ 。(3). 除上面两种情况之外， $\langle i|\hat{h}|j\rangle = 0$ 。即电子不能一次性隧穿到更远的格点上。最后我们还要假定，(4). 两电子间仅当处于同一格点位置时才会有相互作用，即 $\langle lm|V|pn\rangle$ 仅在 $l = p = m = n$ 时才非零，非零值设为 U 。

根据上面假设，我们容易知道(8.110)中的相互作用项现在可以简化为

$$\frac{1}{2} U \sum_{i,\sigma,\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma'}^\dagger c_{i\sigma'} c_{i\sigma} = U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}. \quad (8.111)$$

式中 $\hat{n}_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$, 而且在推导上式最终结果时我们已经用了泡利不相容原理 $c_{i\sigma}^2 = 0$ 。因此, 结合上面所有的简化假设, 最终哈密顿量(8.110)就可以被简化为

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} [c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}] + \epsilon \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}. \quad (8.112)$$

这就是著名的Hubbard 模型, 式中的 $\sum_{\langle i,j \rangle}$ 表示对相邻的格点求和。

8.7 *附录: 单粒子路径积分公式推导

关于费曼路径积分, 我们还有两个重要的问题有待解决, 一是, 对所有路径进行求和该怎么求, 毕竟路径可不是一个离散变量, 甚至一条路径也不是一个简单的实变量, 而是一个关于时间 t 的函数, 所以如何定义这个求和其实是一个很困难的数学问题。第二, 我们还要证明路径积分给出来的结果是幺正的。本节我们就是要就单粒子情形解决这两个问题。我们的解决方案很简单, 就是直接从时间演化算符的哈密顿量表述 $U(T, 0) = \exp\{-iHT/\hbar\}$ 出发, 导出其坐标表象下的路径积分公式。哈密顿量表述的时间演化算符当然是幺正的, 因此其最终导出来的路径积分公式当然也满足幺正性。不仅如此, 这种推导方式还会给出关于如何对路径进行求和的一个定义。

本附录的处理方式基本上是跟随Polchinski, String Theory Volume I, Appendix A, A short course on path integrals的处理。更多的讨论请读者参阅这份原始材料。关于路径积分, 我们推荐的另一份入门材料是, R. Shankar, Principles of Quantum Mechanics 中的相关内容。

下面我们以 \hat{x} 表示一个粒子的正则坐标算符, 以 \hat{p} 表示相应的正则动量算符。路径积分其实就是坐标表象下时间演化算符的计算公式。假设粒子从0时刻的 $|x_i\rangle$ 位置演化到 T 时刻的 $|x_f\rangle$ 位置, 则路径积分关心的就是如下概率幅,

$$\langle x_f | \exp(-iHT/\hbar) | x_i \rangle. \quad (8.113)$$

在前面的章节中我们引入过海森堡绘景, 对于算符 \mathcal{O} , 其相应海森堡绘景中的算符 $\mathcal{O}(t)$ 为

$$\mathcal{O}(t) = \exp(iHt/\hbar) \mathcal{O} \exp(-iHt/\hbar). \quad (8.114)$$

另外，引入海森堡绘景的位置本征态 $|x, t\rangle$ 对于我们来说是方便的，其定义是

$$|x, t\rangle = \exp(iHt/\hbar)|x\rangle. \quad (8.115)$$

很容易验证， $|x, t\rangle$ 满足 $\hat{x}(t)|x, t\rangle = x|x, t\rangle$ ，式中 $\hat{x}(t)$ 为海森堡绘景中的位置算符。很显然，路径积分所关心的坐标表象时间演化算符(8.113)又可以写成

$$\langle x_f, T|x_i, 0\rangle. \quad (8.116)$$

通过在中间 t 时刻插入位置本征态的完备集，我们可以把路径积分关心的概率幅改写成

$$\langle x_f, T|x_i, 0\rangle = \int dx \langle x_f, T|x, t\rangle \langle x, t|x_i, 0\rangle. \quad (8.117)$$

显然，这个方程就是正文中所说的，时间演化算符所满足的基本方程。

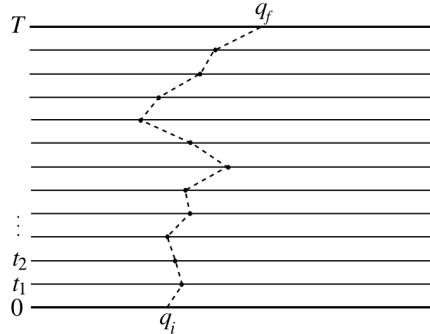


图 8.17: 图片来自于Polchinski的书，图中的 q_i, q_f 在我们这里分别是 x_i, x_f 。

现在，我们如图(8.17)中所示的那样，将整个时间区间 T 等分成 N 个间距为 $\epsilon = T/N$ 的小区间，其中各分割时刻分别为

$$t_m = m\epsilon. \quad (8.118)$$

则通过在每一个中间分割时刻都插入相应位置本征态的完备集，我们有

$$\langle x_f, T|x_i, 0\rangle = \int dx_{N-1} \dots dx_1 \prod_{m=0}^{N-1} \langle x_{m+1}, t_{m+1}|x_m, t_m\rangle. \quad (8.119)$$

式中 $x_0 = x_i, x_N = x_f$ 。

根据我们的定义，有

$$\begin{aligned}\langle x_{m+1}, t_{m+1} | x_m, t_m \rangle &= \langle x_{m+1} | \exp(-iH\epsilon/\hbar) | x_m \rangle \\ &= \int dp_m \langle x_{m+1} | p_m \rangle \langle p_m | \exp(-iH\epsilon/\hbar) | x_m \rangle\end{aligned}\quad (8.120)$$

式中哈密顿算符 H 是一个关于坐标算符和动量算符的函数， $H(\hat{p}, \hat{x})$ 。通过算符对易关系我们总是可以将所有的 \hat{p} 都放到 H 表达式的左边，而将所有的 \hat{x} 都对易到右边，从而有

$$\langle p_m | H(\hat{p}, \hat{x}) | x_m \rangle = H(p_m, x_m) \langle p_m | x_m \rangle. \quad (8.121)$$

从而根据(8.120)式我们有(精确到 ϵ 的一次方阶)

$$\begin{aligned}\langle x_{m+1}, t_{m+1} | x_m, t_m \rangle &= \int dp_m \exp[-iH(p_m, x_m)\epsilon/\hbar] \langle x_{m+1} | p_m \rangle \langle p_m | x_m \rangle \\ &= \int \frac{dp_m}{2\pi\hbar} \exp\left\{-i[H(p_m, x_m)\epsilon - p_m(x_{m+1} - x_m)]/\hbar + O(\epsilon^2)\right\}.\end{aligned}\quad (8.122)$$

将(8.122)式代入(8.119)式，就可以得到

$$\begin{aligned}\langle x_f, T | x_i, 0 \rangle &= \int \frac{dp_{N-1} dx_{N-1}}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_1 dx_1}{2\pi\hbar} \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \\ &\times \exp\left\{-i \sum_{m=0}^{N-1} [H(p_m, x_m)\epsilon - p_m(x_{m+1} - x_m)]/\hbar + O(\epsilon^2)\right\} \\ &\rightarrow \int [dpdx] \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt [p\dot{x} - H(p, x)]\right\}.\end{aligned}\quad (8.123)$$

在上式的最后一行中，我们取了 $N \rightarrow +\infty$ ，即 $\epsilon \rightarrow 0$ 的极限。在这个极限下，上式中的复杂多重积分相当于对所有以 $x(0) = x_i, x(T) = x_f$ 为端点的相空间路径 $x(t), p(t)$ 进行积分。上式最后表达式中的 $\int [dpdx]$ 是对这个积分测度的简记符号。

通常来说，哈密顿量 $H(p, x)$ 关于正则动量 p 是一个二次型，所以(8.123)式中关于 $p(t)$ 的路径积分其实是一个高斯型积分，我们可以把这个积分分掉，根据高斯积分的一般结果我们知道，积掉 $p(t)$ 首先是要将指数因子中的 p 替换成满足下式的 p ，

$$0 = \frac{\partial}{\partial p} [p\dot{x} - H(p, x)] = \dot{x} - \frac{\partial}{\partial p} H(p, x), \quad (8.124)$$

这样消去 p 以后, $p\dot{x} - H$ 的结果实际上就是拉格朗日量 $L(x, \dot{x})$, 这个过程其实就是所谓的勒让德变换。因此, 由(8.123)式我们就可以进一步得到

$$\langle x_f, T | x_i, 0 \rangle = \int [dx] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T dt L(x, \dot{x}) \right\} = \sum_{x(t)} e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}. \quad (8.125)$$

这个式子就是坐标表象时间演化算符的路径积分公式, 在这个式子的最后我们已经示意性地将对所有路径的积分写成了对所有路径的求和。当然, 上面在对 $p(t)$ 进行高斯积分时我们会得到一些积分值, 在写出(8.125)式这个结果时, 我们已经把所有这些 $p(t)$ 的积分值都吸收到积分测度 $[dx]$ 的定义中去了。

我们可以利用(8.125)式这个路径积分公式讨论量子力学与经典力学间的对应关系。由于两条邻近路径的作用量之差近似为一阶变分 δS , 而从(8.125)式的最后结果可以看出, 当 $\hbar \rightarrow 0$ 时, 一般来说相邻路径的相位差 $\frac{\delta S}{\hbar}$ 是随着路径的微小变动快速振荡的, 因此在 $\hbar \rightarrow 0$ 时, 相邻路径通常总是干涉相消的, 除非我们考虑的是 $\delta S = 0$ 这条路径的邻近路径。对于这条 $\delta S = 0$ 的路径, 它和邻近路径的相位差近似为 0, 从而是干涉加强的。很显然, 这就是最小作用量原理, 这条干涉加强的路径就是所谓的经典路径。从这个讨论我们再一次看到, 经典物理是量子物理在 $\hbar \rightarrow 0$ 时的极限。