[高等量子理论专题系列讲座]

[第 4 讲]

"一次量子化"与"二次量子化"
——"古怪"与"不古怪"

I，前 言

II，量子力学的建立——何必借助这个"无厘头"的一次量子化！

III， *Maxwell* 场协变量子化——需要"鬼光子"的一次量子化

1，*Lorenz* 规范下协变形式量子化

2，不定度规、负模态、鬼光子

3、附加条件——"协变性要求有鬼，条件保证了看不见它们"

IV，" *Schrödinger* 场"的二次量子化——逻辑结论，不古怪

1，" *Schrödinger* 场"的"经典"场论

2，" *Schrödinger* 场"按对易规则二次量子化

3，"*Schrödinger* 场"按 *Jordan-Wigner* 规则二次量子化

4，将两种二次量子化结果转入粒子数表象

5，与全同多体量子力学的等价性——逻辑结论，所以不古怪

6，二次量子化中对易规则选择问题

V，自作用" *Schrödinger* 场"的二次量子化——再次不古怪

1，自作用" *Schrödinger* 场"的二次量子化

2，转入粒子数表象

3，转入坐标表象

VI，二次量子化方法评论——有理性基础的推广

※ ※ ※

I, 前　言

学过量子力学的人都知道，文献和教科书中经常会遇到如下说法：经典力学经过“一次量子化”便“过渡到”量子力学。其实，从科学逻辑观点看，这个“一次量子化”实在是一个无逻辑的“无厘头”的东西！然而，古怪还并不到此为止。更有甚者：在量子力学中，再经过“第二次量子化”，便从单体量子力学理论转向多体全同粒子量子场论理论。并且理论与实验还广泛符合，十分成功！

本讲专门谈谈这两个古怪。结论是：一次量子化是一个“无厘头”的古怪，二次量子化的基础是波粒二象性，是理性的、不古怪。

II，量子力学的建立——何必借助这个“无厘头”的一次量子化！

简单复习一下“一次量子化”的内容：将牛顿力学的力学量及其关系转化为作用到系统状态空间上的算符（开始了“无厘头”的逻辑飞跃！），同时得到坐标和动量的对易规则，构成算符的非对易代数：

$$\begin{cases} \vec{r} \to \hat{\vec{r}}, \quad \vec{p} \to \hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla, \quad E \to \hat{E} = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t} \\ \left[\hat{x}_i, \hat{p}_j\right] = \delta_{ij} i\hbar \qquad (i,j = x,y,z) \end{cases} \tag{4.1}$$

再将牛顿力学能量关系式 $E = \dfrac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$ 相应地转化成算符方程，作用到表征状态的复值函数 $\psi(\vec{r},t)$ 上，就得到状态运动方程：

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r},t) \tag{4.2}$$

现在既有了算符的非对易运算规则，又有了状态运动方程，再添加一

点与实验观测和物理解释有关的辅助公设，就能建立起非相对论量子力学。这就是著名的不讲道理、十分古怪的“一次量子化”过程！

其实，这是从“人择原理”和“先入为主”的偏执出发，由偏执诱导出逆向思维，结果必然就是这么个“一次量子化”的古怪东西！为了说明这个观点，需要从几何光学和电磁波理论的关系谈起（虽然光学和电磁波理论之间并不存在经典与量子的过渡）。众所周知，（一般波长的）*Maxwell* 电磁波理论是（极短波长近似的）几何光学的推广。因为，如果对 *Maxwell* 电磁波理论取极短波长极限，能流矢量便转化为光线概念，接着就顺理成章地、准确地建立起几何光学 [1]。但如果按照“先入为主”的做法，设法将这个逻辑推理过程逆转过来，试图从几何光学“导出”或“理解”***Maxwell*** 理论，那就必需引入一些很古怪的、“无厘头”的、无逻辑的、导致“波动化”的假设才行。当然，物理学发展的历史事实是人们没有这样做，而是依据电磁现象的众多实验事实，结合逻辑归纳，直接构建了（包容几何光学的）***Maxwell*** 电磁波理论。

牛顿力学和量子力学的传承关系也类似如此。从微观世界过渡到宏观世界时，宏观物体的相对（！）*de Broglie* 波波长趋于零，在极短波长极限下，（具有波动性的）量子力学便过渡到了（描述质点轨道运动的，不具有波动性的）牛顿力学。同样，从牛顿力学发展到如何建立量子力学，如同从光学发展到如何建立 ***Maxwell*** 电磁波理论那样，最直接了当的办法就是依据微观实验事实，结合逻辑演绎归纳，

[1] ***M.***玻恩，***E.***沃耳夫，《光学原理》，北京：科学出版社，**1978** 年。第三章。

直接构建（包容牛顿力学的）量子力学。物理学发展的历史事实就是这样，也应当是这样。

但是，基于人类固有的尺度、质量范围和观测系统，人类注定属于这个特定尺度下的宏观世界。人类别无选择地首先掌握了宏观世界的物理学——牛顿力学。但是，人们应当意识到，**最先掌握的物理学只是离我们手边最近的物理学，未见得就是自然界中最基本、最普适的物理学！尽管如此，由此开始，人类自然而不自觉地具有了“人择原理”的偏颇，经典观念的束缚，形成了先入为主的成见，制约了人们的认知能力：既然微观世界物理学和所熟悉的宏观世界物理学如此相悖，人们总是顽固地想从宏观世界物理学的角度去理解它，激发起努力从牛顿力学去理解（甚至“推导”）量子力学的“逆向思维”。于是拼凑出这么个无厘头的“一次量子化”。**

其实，物理学发展并不需要这个古怪的“一次量子化”，不需要它所显示的缺乏理性、缺乏逻辑的神秘，唯一需要的只是“相信实验，相信逻辑”的科学理性精神！ 正是基于这种科学理性精神，导致 ***Maxwell*** 建立经典电磁理论，导致 ***Einstein*** 建立狭义广义相对论、甚至导致 ***Einstein*** 提出后来连他本人也不理解的光子概念！

III, *Maxwell* 场协变规范量子化——需要“鬼光子”的一次量子化

1, *Lorenz* 规范下协变形式量子化

i，序言。众所周知，***Maxwell*** 场蕴藏着物理上多余的规范

自由度，应当采用约束系统量子化办法进行量子化[2]。用势A_μ表述的电磁场，要保持 ***Lorentz*** 变换协变形式，必须带有纵向和标量的非物理自由度；一旦消除这些非物理自由度，形式就不是协变的。于是，**只依赖于物理的动力学自由度的正则量子化方法和理论的协变形式并不相容**。辐射规范优点是只量子化该场的物理自由度，但这样就牺牲了协变形式。本节叙述保持协变形式的量子化，看结果到底如何。在 ***Lorenz*** 规范下，取 ***Lagrangian*** 密度$\mathscr{L}_{em}=-\frac{1}{2}\left(\partial_\mu A_\nu\right)^2$，有

$$\begin{cases} H=\frac{1}{2}\int d^3x\left(\pi_\mu\pi_\mu+\nabla A_\mu\cdot\nabla A_\mu\right) \\ \Box A_\mu=0\,,\quad \pi_\mu=\dot{A}_\mu\,,\quad \partial_\mu A_\mu=0 \end{cases} \tag{4.3}$$

显然，**4** 组正则场量对$\left(A_\mu(x),\pi_\mu(x)\right)$之间，如果没有约束条件$\partial_\mu A_\mu=0$相互关联，彼此完全独立，理论就扩大了经典 ***Maxwell*** 理论，包含了非 ***Maxwell*** 的自由度。

ii，协变形式等时对易规则。现在暂且不管附加的协变规范条件$\partial_\mu A_\mu=0$，于是 **4** 个A_μ运动方程可以当作平行独立的 **4** 个自由度处理。对 **4** 组$\left(A_\mu,\pi_\mu\right)$同时实施正则量子化，即设定[3]

$$\begin{cases} \left[A_\mu(\vec{x}t),\pi_\nu(\vec{x}'t)\right]=i\delta_{\mu\nu}\delta(\vec{x}-\vec{x}') \\ \left[A_\mu(\vec{x}t),A_\nu(\vec{x}'t)\right]=\left[\pi_\mu(\vec{x}t),\pi_\nu(\vec{x}'t)\right]=0 \end{cases} \tag{4.4}$$

由量子场场量的运动方程，

---

[2] 约束系统量子化可见张永德《高等量子力学》，北京：科学出版社，**2010** 年。第 **7** 章。

[3] 对第一式两边∂_μ，左边由于$\partial_\mu A_\mu=0$为零，而右边不为零。这说明，此处对易规则已和 ***Lorenz*** 条件相矛盾，算符$A_\mu(x)$作为时空函数已不能满足 ***Lorenz*** 条件。由下面知道，***Lorenz*** 条件总是要将纵分量和类时分量联系起来。这个矛盾似乎可以只对 **2** 个横分量量子化，而不对类时、纵向分量也量子化来解决。但这是非协变的，因为纵横分解和 ***Lorentz*** 观察系有关。上面这些讨论也可对非等时对易子$\left[A_\mu(x),A_\nu(x)\right]=i\delta_{\mu\nu}D(x-x')$进行。

$$\dot{A}_\mu = \frac{1}{i}\left[A_\mu, H\right], \quad \dot{\pi}_\mu = \frac{1}{i}\left[\pi_\mu, H\right] \tag{4.5a}$$

为记号简明，下面记 $A_\mu(\vec{x}t) = A_\mu$，$A_\nu(\vec{x}'t) = A'_\nu$ 等，于是得到

$$\dot{A}_\mu = \frac{1}{2i}\int d^3x'\left[A_\mu,\ \pi_\nu'^2 + \left(\nabla' A'_\nu\right)^2\right] = \frac{1}{2i}\int d^3x'\left[A_\mu, \pi'_\nu\pi'_\nu\right]$$

$$= \frac{1}{i}\int d^3x' i\delta_{\mu\nu}\delta(\vec{x}-\vec{x}')\pi'_\nu = \pi_\mu$$

$$\dot{\pi}_\mu = \frac{1}{2i}\int d^3x'\left[\pi_\mu, \pi_\nu'^2 + \left(\nabla' A'_\nu\right)^2\right] = \frac{1}{2i}\int d^3x'\left[\pi_\mu, \nabla' A'_\nu \cdot \nabla' A'_\nu\right]$$

$$= \int d^3x' \cdot \delta_{\mu\nu}\delta(\vec{x}-\vec{x}')\Delta' A'_\nu = \Delta A_\mu(\vec{x}t)$$

将两者结合，即得与原先形式相同的场算符 $A_\mu(\vec{x}t)$ 的量子场方程,

$$\Box A_\mu(x) = 0 \tag{4.5b}$$

iii，向动量空间转换。由于方程形式完全相同，可以直接采用经典的 ***Fourier*** 展开，只须添加反映非对易代数的量子系数即可。于是，选定 $\vec{k}$ 后，可取如下正交归一的 4 矢四重标架 [4],

$$e_1(k) = \left(\vec{\varepsilon}_1(\vec{k}), 0\right), e_2(k) = \left(\vec{\varepsilon}_2(\vec{k}), 0\right), e_3(k) = \left(\frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}, 0\right), e_4(\vec{k}) = i\eta = i\left(\vec{0}, i\right) \tag{4.6a}$$

极化标架取定后，平面波完备基可取为（取 $c=1,\ \omega = |\vec{k}|$。否则 $\omega = c|\vec{k}|$）

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\frac{e_\lambda\left(\vec{k}\right)}{\sqrt{2|\vec{k}|}}e^{\pm ikx} \quad \left(kx = \vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t,\ \lambda = 1,2,3,4\right) \tag{4.6b}$$

考虑 $A_\mu(\vec{x}t) = \left(\vec{A}, i\varphi\right)$ 中 $\vec{A}$、φ 均是实的，量子化应为厄米算符，A_4 量子

---

[4] 这是对静止质量为零的 4 矢四重标架，其中 $\vec{\varepsilon}_1(\vec{k}) \perp \vec{\varepsilon}_2(\vec{k}) \perp \vec{k}$。它们用于描述极化状态。注意，由此特殊 ***Lorentz*** 系转入一般 ***Lorentz*** 系时，e_3, e_4 分别为

$e_3 = \dfrac{k + \eta'(k\cdot\eta')}{-(k\cdot\eta')}$（此式在 $\eta = \left(\vec{0}, i\right)$ ***Lorentz*** 系中还原为 $\left(\dfrac{\vec{k}}{|\vec{k}|}, 0\right)$）；$e_4 = i\eta' = i\left(\vec{\eta}', i\eta'_4\right)$

化为反厄米算符。场算符 A_μ 的时空函数展开为 [5]，

$$A_\mu(\vec{x}t)=\sum_{\lambda=1}^{4}\int\frac{d^3k}{\sqrt{2|\vec{k}|(2\pi)^3}}e_\lambda(\vec{k})_\mu\left(a_\lambda(\vec{k})e^{ikx}+(-1)^{\delta_{\lambda 4}}a_\lambda^\dagger(\vec{k})e^{-ikx}\right) \quad (4.6c)$$

这里，量子系数 $a_\lambda(\vec{k}),a_\lambda^\dagger(\vec{k})$ 体现场算符的非对易代数性质。注意 $e_\lambda^*(\vec{k})_\mu=(-)^{\delta_{\lambda 4}+\delta_{\mu 4}}e_\lambda(\vec{k})_\mu$ [6]，有 $A_\mu^\dagger(x)=(-)^{\delta_{\mu 4}}A_\mu(x)$。说明 $A_i(x)$ 是厄米场，$A_4(x)$ 是（由纯虚量量子化而来）反厄米场。与 $A_\mu(x)$ 展式相应，有

$$\pi_\mu(x)=-i\sum_{\lambda=1}^{4}\int\frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}}\sqrt{\frac{|\vec{k}|}{2}}e_\lambda(\vec{k})_\mu\left(a_\lambda(\vec{k})e^{ikx}-(-1)^{\delta_{\lambda 4}}a_\lambda^\dagger(\vec{k})e^{-ikx}\right) \quad (4.6d)$$

由 A_μ、π_μ 展开式反解求得 a_λ、a 的表达式为:

$$\begin{aligned}a_\lambda(\vec{k})&=\int\frac{d^3x}{\sqrt{(2\pi)^3}}e^{-ikx}\left\{\sqrt{\frac{|\vec{k}|}{2}}A_\mu(x)+i\sqrt{\frac{1}{2|\vec{k}|}}\pi_\mu(x)\right\}e_\lambda(\vec{k})_\mu\\&=\int\frac{d^3x}{\sqrt{(2\pi)^3}}i\sqrt{\frac{1}{2|\vec{k}|}}\left\{-A_\mu\partial_t e^{-ikx}+e^{-ikx}\partial_t A_\mu\right\}e_\lambda(\vec{k})_\mu\\&=i\int\frac{d^3x}{\sqrt{2(2\pi)^3|\vec{k}|}}e^{-ikx}\overleftrightarrow{\partial}_t\left(e_\lambda(\vec{k})_\mu A_\mu\right)\end{aligned} \quad (4.6e)$$

$$\begin{aligned}a_\lambda^\dagger(\vec{k})&=(-)^\lambda(-1)^{\delta_{\lambda 4}}e^{-2i|\vec{k}|t}\int\frac{d^3x}{\sqrt{(2\pi)^3}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}+i|\vec{k}|t}\left\{\sqrt{\frac{|\vec{k}|}{2}}A_\mu(x)-i\sqrt{\frac{1}{2|\vec{k}|}}\pi_\mu(x)\right\}e_\lambda(-\vec{k})_\mu\\&=(-1)^{\delta_{\lambda 4}}\int\frac{d^3x}{\sqrt{(2\pi)^3}}i\sqrt{\frac{1}{2|\vec{k}|}}\left\{e^{ikx}\left(-i|\vec{k}|\right)A_\mu-e^{ikx}\dot{A}_\mu\right\}e_\lambda(\vec{k})_\mu\end{aligned}$$

---

[5] 展开式中 $(-1)^{\delta_{\lambda 4}}$ 的负号和 $e_4(\vec{k})=i\eta$ 中的 i 有直接关系（因为要求 A_4 是反厄米的，而 $e_4(\vec{k})_4$ 又是实的 $\Rightarrow$ 不得不引入 $(-1)^{\delta_{\lambda 4}}$!）。但如果重新定义 $e_4=\eta$，则由于 $e_4(\vec{k})_4$ 为纯虚（确切地说，e_4 类时），$e_4^2(\vec{k})=-1$，而且由后面 $a_4(\vec{k})$、$a_4^\dagger(\vec{k})$ 的表达式知仍有: $\left[a_4(\vec{k}),a_4^\dagger(\vec{k}')\right]=-\delta(\vec{k}-\vec{k}')$! 所以，此对易子右边负号是实质性的，无法避免。

[6] 第一个四维矢量：空间分量为实的，只时间分量为纯虚，故有 $(-)^{\delta_{\mu 4}}$；但对 $e_4(\vec{k})=i\eta$，前有 i，故双多一相因子 $(-1)^{\delta_{\lambda 4}}$。

$$=\frac{i(-1)^{\delta_{\lambda4}}}{\sqrt{2|\vec{k}|}}\int\frac{d^3x}{\sqrt{(2\pi)^3}}e_\lambda(\vec{k})_\mu A_\mu\overleftrightarrow{\partial}_t e^{ikx}\ ^{7}\tag{4.6f}$$

由$a_\lambda(\vec{k})$、$a^\dagger_\lambda(\vec{k})$这些关系，可导出它们之间的等时对易规则,

$$\left[a_\lambda(\vec{k}),a^\dagger_{\lambda'}(\vec{k}')\right]=$$

$$=-\frac{(-)^{\delta_{\lambda'4}}}{2\sqrt{|\vec{k}||\vec{k}'|}}\int\frac{d^3(xx')}{(2\pi)^3}\left[e^{-ikx}\overleftrightarrow{\partial}_t\left(e_\lambda(\vec{k})_\mu A_\mu(\vec{x}t)\right),\ e_{\lambda'}(\vec{k}')_\nu A_\nu(\vec{x}'t)\overleftrightarrow{\partial}_t e^{ik'x'}\right]$$

$$=-\frac{(-)^{\delta_{\lambda'4}}}{2\sqrt{|\vec{k}||\vec{k}'|}}\int\frac{d^3(xx')}{(2\pi)^3}e_\lambda(\vec{k})_\mu e_{\lambda'}(\vec{k}')_\nu\left\{e^{-ikx}\left[\dot{A}_\mu(\vec{x}t),A_\nu(\vec{x}'t)\right]\partial_t e^{ik'x'}+\right.$$

$$\left.+\left(\partial_t e^{-ikx}\right)\left[A_\mu(\vec{x}t),\dot{A}_\nu(\vec{x}'t)\right]e^{ik'x'}\right\}$$

$$=\frac{(-)^{\delta_{\lambda'4}}}{2\sqrt{|\vec{k}||\vec{k}'|}}\int\frac{d^3x}{(2\pi)^3}e_\lambda(\vec{k})_\mu e_{\lambda'}(\vec{k}')_\mu e^{-ikx+ik'x}\left(|\vec{k}|+|\vec{k}'|\right)$$

$$=\frac{(-)^{\delta_{\lambda'4}}}{2\sqrt{|\vec{k}||\vec{k}'|}}e_\lambda(\vec{k})_\mu e_{\lambda'}(\vec{k}')_\mu\left(|\vec{k}|+|\vec{k}'|\right)\delta(\vec{k}-\vec{k}')=(-)^{\delta_{\lambda4}}\delta_{\lambda\lambda'}\delta(\vec{k}-\vec{k}')\ ^{8}$$

$$\left[a^\dagger_\lambda(\vec{k}),a^\dagger_{\lambda'}(\vec{k}')\right]=\frac{-(-)^{\delta_{\lambda4}+\delta_{\lambda'4}}}{2\sqrt{k_0k_0'}}\int\frac{d^3(xx')}{(2\pi)^3}e_\lambda(\vec{k})_\mu e_{\lambda'}(\vec{k}')_\nu\left[A_\mu(\vec{x}t)\overleftrightarrow{\partial}_t e^{ikx},A_\nu(\vec{x}'t)\overleftrightarrow{\partial}_t e^{ik'x'}\right]$$

$$=\frac{(-)^{\delta_{\lambda4}+\delta_{\lambda'4}}}{2\sqrt{k_0k_0'}}\int\frac{d^3(xx')}{(2\pi)^3}e_\lambda(\vec{k})_\mu e_{\lambda'}(\vec{k}')_\nu\left\{\left(\partial_t e^{ikx}\right)e^{ik'x'}\left[A_\mu(\vec{x}t),\dot{A}_\nu(\vec{x}'t)\right]\right.$$

$$\left.+e^{ikx}\left(\partial_t e^{ik'x'}\right)\left[\dot{A}_\mu(\vec{x}t),A_\nu(\vec{x}'t)\right]\right\}$$

$$=\frac{(-)^{\delta_{\lambda4}+\delta_{\lambda'4}}}{2\sqrt{k_0k_0'}}\int\frac{d^3x}{(2\pi)^3}e_\lambda(\vec{k})_\mu e_{\lambda'}(\vec{k}')_\mu\left(|\vec{k}|-|\vec{k}'|\right)e^{ikx+ik'x}=0$$

同理有$\left[a_\lambda(\vec{k}),a_{\lambda'}(\vec{k}')\right]=0$。总之可得

$$\begin{cases}\left[a_\lambda(\vec{k}),a_{\lambda'}(\vec{k}')\right]=\left[a^\dagger_\lambda(\vec{k}),a^\dagger_{\lambda'}(\vec{k}')\right]=0\\ \left[a_\lambda(\vec{k}),a^\dagger_{\lambda'}(\vec{k}')\right]=(-)^{\delta_{\lambda'4}}\delta_{\lambda\lambda'}\delta(\vec{k}-\vec{k}')\end{cases}\qquad(\lambda,\lambda'=1,2,3,4)\tag{4.7}$$

---

[7] 此式亦可直接由$a_\lambda(\vec{k})$取“†”得到，只需要注意：

$$A^\dagger_\mu(x)=(-)^{\delta_{\mu4}}A_\mu(x)、e^*_\lambda(\vec{k})_\mu=(-)^{\delta_{\lambda4}+\delta_{\mu4}}e_\lambda(\vec{k})_\mu$$

[8] 注意即使前面取$e_4(\vec{k})=i\eta$，从而消去$A_\mu(x)$展开式中的$(-1)^{\delta_{\lambda4}}$相因子，从而也就消去了此处的$(-1)^{\delta_{\lambda'4}}$因子，但却多出了一个$e_4(\vec{k})_\mu e_4(\vec{k})_\mu=-1$，此式还是最终存在$(-1)^{\delta_{\lambda4}}$。

$\vec{k}$ 空间中 $H,\vec{P}$ 表达式(取正规乘积，减去真空态的无穷大本底)分别为

$$H=\frac{1}{2}\int d^3x\left\{\nabla A_\mu(x)\cdot\nabla A_\mu(x)+\dot{A}_\mu(x)\dot{A}_\mu(x)\right\}$$
$$=\int d^3k\cdot|\vec{k}|\left\{a_1^+(\vec{k})a_1(\vec{k})+a_2^+(\vec{k})a_2(\vec{k})+a_3^+(\vec{k})a_3(\vec{k})-a_4^+(\vec{k})a_4(\vec{k})\right\} \tag{4.8a}$$

$$\vec{P}=-\int d^3x\dot{A}_\mu(x)\nabla A_\mu(x)$$
$$=\int d^3k\cdot\vec{k}\cdot\left(a_1^+(\vec{k})a_1(\vec{k})+a_2^+(\vec{k})a_2(\vec{k})+a_3^+(\vec{k})a_3(\vec{k})-a_4^+(\vec{k})a_4(\vec{k})\right) \tag{4.8b}$$

2，不定度规、负模态、鬼光子

上面将 **4** 个分量平行地实施了正则量子化。由于存在非物理的、非 ***Maxwell*** 的自由度，这个量子场当然不是量子 ***Maxwell*** 场。本节先总结分析结果，下节考察加上怎样的约束，才能够将这两类多余自由度消除掉。从而在物理上等效于对物理的 ***Maxwell*** 场进行量子化。

上面已经表明，$\lambda=1,2,3$ 是正常 ***Boson***，**但 $\lambda=4$ 是反常 *Boson*，**

$$\left[a_4(\vec{k}),a_4^+(\vec{k}')\right]=-\delta(\vec{k}-\vec{k}') \tag{4.9a}$$

对易子右边出现一个反常的负号，它是不可避免的。因为 *Minkowski* 空间是 $3+1$ 维赝欧氏空间、矢量模长有不定性。或者说，它是此空间度规不定性的必然结果。（注意脚注 **5** 和 **8**，此对易子右边出现负号是不可避免的）。

上面对易子右边负号的重要后果是：**场算符定义在其上的 *Hilbert* 空间具有不定度规，即此空间具有负模态** [9]**，因而是鬼态。**为了方便地说清这个问题，转入箱归一：

$$\int d^3k\to\sum_{\vec{k}}\Delta V_k，\ \Delta V_k=\frac{(2\pi)^3}{V}，\ \delta(\vec{k}-\vec{k}')\to\frac{\delta_{\vec{k}\vec{k}'}}{\Delta V_k}，\ a_\lambda(\vec{k})\sqrt{\Delta V_k}=a_{\vec{k}\lambda}$$

---

[9] ***S.N.*** 古普达，《量子电动力学》，北京师范大学出版社，**1981** 年。**P.32**；***D.*** 卢里，《粒子与场》，科学出版社，**1981** 年。**P.175**。

于是对易子成为

$$\left[a_{\vec{k}4}, a^{\dagger}_{\vec{k}'4}\right] = -\delta_{\vec{k}\vec{k}'} \tag{4.9b}$$

可以构造单个标量光子态$\left|1_{\vec{k}4}\right\rangle = a^{+}_{\vec{k}4}\left|0\right\rangle$。这就是一个负模态！因为

$$\left\langle 1_{\vec{k}4} \middle| 1_{\vec{k}4}\right\rangle = \left\langle 0\right| a_{\vec{k}4} a^{+}_{\vec{k}4}\left|0\right\rangle = \left\langle 0\right|\left[a_{\vec{k}4}, a^{+}_{\vec{k}4}\right]\left|0\right\rangle = -1$$

一般地有

$$\left\langle n_{\vec{k}4} \middle| n_{\vec{k}4}\right\rangle = (-)^{n_{\vec{k}4}} \tag{4.9c}$$

证明：一般的光子态为

$$\left|n_1, n_2, n_3, n_4\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! n_3! n_4!}}\left(a^{+}_{\vec{k}1}\right)^{n_1}\left(a^{+}_{\vec{k}2}\right)^{n_2}\left(a^{+}_{\vec{k}3}\right)^{n_3}\left(a^{+}_{\vec{k}4}\right)^{n_4}\left|0\right\rangle$$

故单个标量光子的一般态为

$$\left|n_1, n_2, n_3, 1_4\right\rangle = \left|n_1, n_2, n_3\right\rangle\left|1_4\right\rangle = a^{+}_{\vec{k}4}\left|0_4\right\rangle\left|n_1, n_2, n_3\right\rangle$$

于是，可以只考虑标量光子，并略去$\vec{k}$记号，即

$$\left|n_4\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_4!}}\left(a^{+}_4\right)^{n_4}\left|0\right\rangle$$

已知$\left\langle 1_4 \middle| 1_4\right\rangle = -1$，以及

$$\left\langle 2_4 \middle| 2_4\right\rangle = \frac{1}{2}\left\langle 0\right|\left(a_4\right)^2\left(a^{+}_4\right)^2\left|0\right\rangle = \frac{1}{2}\left\langle 0\right|\left[\left(a_4\right)^2, \left(a^{+}_4\right)^2\right]\left|0\right\rangle = 1$$

现用归纳法证明内积符号的交替：设$\left\langle n_4 - 1 \middle| n_4 - 1\right\rangle = (-)^{n_4 - 1}$正确，则有

$$\left\langle n_4 \middle| n_4\right\rangle = \frac{1}{n_4}\left\langle n_4 - 1\right| a_4 \cdot \left(a^{+}_4\right)^{n_4}\left|0\right\rangle \frac{1}{\sqrt{(n_4 - 1)!}}$$

$$= \frac{1}{n_4\sqrt{(n_4 - 1)!}}\left\langle n_4 - 1\right|\left[a_4, \left(a^{+}_4\right)^{n_4}\right]\left|0\right\rangle = \frac{1}{n_4\sqrt{(n_4 - 1)!}}\left\langle n_4 - 1\right|(-)n_4\left(a^{+}_4\right)^{n_4 - 1}\left|0\right\rangle$$ [10]

$$= -\left\langle n_4 - 1 \middle| n_4 - 1\right\rangle = (-)^{n_4}$$ [11]

---

[10] 这一步利用了：若$\left[a, a^{\dagger}\right] = -1$，则$\left[a, \left(a^{\dagger}\right)^n\right] = -n\left(a^{\dagger}\right)^{n-1}$，此公式易用归纳法证之。

也正确。证毕。 接着下面证明：标量光子的粒子数算符为，

$$N_{\vec{k}4}=-a_{\vec{k}4}^{+}a_{\vec{k}4} \tag{4.9d}$$

证明： $N_{\vec{k}4}\left|n_{\vec{k}4}\right\rangle=\left(-a_{\vec{k}4}^{+}a_{\vec{k}4}\right)\frac{1}{\sqrt{n_{\vec{k}4}!}}\left(a_{\vec{k}4}^{+}\right)^{n_4}\left|0\right\rangle=-\frac{1}{\sqrt{n_{\vec{k}4}!}}a_{\vec{k}4}^{+}\left[a_{\vec{k}4},\left(a_{\vec{k}4}^{+}\right)^{n_4}\right]\left|0\right\rangle$

$$=-\frac{1}{\sqrt{n_{\vec{k}4}!}}a_{\vec{k}4}^{+}\left(-n_{\vec{k}4}\right)\left(a_{\vec{k}4}^{+}\right)^{n_4-1}\left|0\right\rangle=n_{\vec{k}4}\left|n_{\vec{k}4}\right\rangle$$

由此可知，**量子化电磁场 *Hamiltonian* H 的本征值总是非负的。然而，由于度规的不定性， H 的期望值却可能是负的！** 即有

$$\left\langle n_{\vec{k}4}\left|H\right|n_{\vec{k}4}\right\rangle=n_{\vec{k}4}\left|\vec{k}\right|\left\langle n_{\vec{k}4}\middle|n_{\vec{k}4}\right\rangle=(-)^{n_{\vec{k}4}}n_{\vec{k}4}\left|\vec{k}\right|$$

最后应当指出，**不定度规的量子力学，**

$$\left\langle\psi\middle|\psi\right\rangle=0,\pm1 \tag{4.10}$$

将会产生两个根本性的困难：其一、负模态表示负概率，物理上这是难以理解的；其二、零模态也会发生物理解释上的困难，因为一个态若是零模 $\left\langle\psi\middle|\psi\right\rangle=0$，用任意常数乘它还是个零模态 $f\left|\psi\right\rangle=\left|\psi'\right\rangle$。于是，除零期望值外，这会导致任何力学量 Ω 在该零模态中有任意期望值：$\left\langle\psi\left|\Omega\right|\psi\right\rangle\neq\left\langle\psi'\left|\Omega\right|\psi'\right\rangle$！正由于零模长或负模长的态矢在物理解释上有困难，只能在确保这两类态物理上不可观测条件下，才可以使用这种不定度规。

3、附加条件——“协变性要求有鬼，约束条件保证看不见它们”

前面一再提及，无论从经典场论或量子场论看，为使理论是物理的，还必须附加规范约束条件。对经典场它是 $\partial_\mu A_\mu=0$；对量子场，本来应当相应写为算符方程 $\partial_\mu A_\mu\left|A\right\rangle=0$， $\left|A\right\rangle$ 为 ***Hilbert*** 空间的任意态

---

[11] 或一般地有：$\left\langle n_1,n_2,n_3,n_4\middle|n_1',n_2',n_3',n_4'\right\rangle=(-)^{n_4}\delta_{n_1n_1'}\delta_{n_2n_2'}\delta_{n_3n_3'}\delta_{n_4n_4'}$

矢[12]。但是，这个约束太强，以致真空态也不能满足这一条件，从而也成了非物理的！事实上，根据这一条件应有

$$\partial_\mu A_\mu|0\rangle = 0 \quad 和 \quad \langle 0|\partial_\mu A_\mu = 0$$

分别左乘、右乘以 $A_\nu(\vec{x}'t')$ 之后相减，得

$$0 = \langle 0|\partial_\mu\left[A_\mu(\vec{x}t), A_\nu(\vec{x}'t')\right]|0\rangle$$

$$= \partial_\mu\left(i\delta_{\mu\nu}D(x-x')\right)\langle 0|0\rangle = i\left(\partial_\nu D(x-x')\right)\langle 0|0\rangle$$

由于 $\partial_\nu D(x-x') \neq 0$，导致 $\langle 0|0\rangle = 0$。这不合理。因此附加条件必须放宽。

经过 20 多年不成功的尝试之后，直到 1950 年，*Gupta* **大胆吸纳上述不定度规思路，并改用 $A_\mu = A_\mu^{(+)} + A_\mu^{(-)}$ 中只含湮灭算符的正频部分 $A_\mu^{(+)}$ 作用为零作为选择物理态的条件**[13]，

$$\partial_\mu A_\mu^{(+)}(x)|P\rangle = 0 \tag{4.11a}$$

$|P\rangle$ 为物理态子空间中任意态矢。作为与经典条件 $\partial_\mu A_\mu = 0$ 对照，用上述条件和其厄密共轭 $\langle P|\partial_\mu A_\mu^{(-)} = 0$ 立即可得：**算符 $\partial_\mu A_\mu$ 在物理态子空间中全部矩阵元为零。**设 $|P\rangle$ 和 $|P'\rangle$ 为此子空间的两个任意态矢，有

$$\langle P'|\partial_\mu A_\mu|P\rangle = \langle P'|\partial_\mu A_\mu^{(-)}\cdot|P\rangle + \langle P'|\cdot\partial_\mu A_\mu^{(+)}|P\rangle = 0$$

就是说，**算符 $\partial_\mu A_\mu$ 其实并不恒为零，只是在物理态子空间中看它是零。下面就用这个附加条件区分 *Hilbert* 空间的物理态和非物理态**。

将条件 $\partial_\mu A_\mu^{(+)}|P\rangle = 0$ 转入粒子数表象，可以看清楚 $|P\rangle$ 的组成。由

---

[12] 一般说来，限制性条件可对两方面起作用：一是限制算符 A_μ；另一是限制后面态矢——符合此条件的态才是物理态，否则是非物理态。由于算符 A_μ 已经确定，无法对其进一步限制，所以采取后一种方式。

[13] *S.N. Gupta, Proc. Phys.Soc. London,* **A63(1950) 681**；亦见 **S.N.**古普达，《量子电动力学》，**P. 69**。

$$A_\mu^{(+)}(x)=\sum_{\lambda=1}^{4}\int\frac{d^3k}{\sqrt{2k_0(2\pi)^3}}e_\lambda(\vec{k})a_\lambda(\vec{k})e^{ikx}$$

代入$\partial_\mu A_\mu^{(+)}|P\rangle=0$中，得

$$\sum_{\lambda=1}^{4}\int\frac{d^3k}{\sqrt{2k_0(2\pi)^3}}ie_\lambda(\vec{k})\cdot ke^{ikx}a_\lambda(\vec{k})|P\rangle=0$$

由于x任意性，可以得到物理态$|P\rangle$必须满足的条件[14]，

$$\sum_{\lambda=1}^{4}k\cdot e_\lambda(\vec{k})a_\lambda(\vec{k})|P\rangle=0$$

由于$k\cdot e_1(\vec{k})=k\cdot e_2(\vec{k})=0$[15]、$k\cdot e_3(\vec{k})=|\vec{k}|=-k\cdot\eta$、$k\cdot e_4(\vec{k})=ik\cdot\eta$，由上式得

$$(k\cdot\eta)\left(a_3(\vec{k})-ia_4(\vec{k})\right)|P\rangle=0\quad(\forall\vec{k})$$

或

$$\left[a_3(\vec{k})-ia_4(\vec{k})\right]|P\rangle=0 \tag{4.11b}$$[16]

此式明确表述了物理态中含有纵向光子和标量光子时应遵从的约束。

下面具体分析这种约束产生的后果。可以看出，该条件将这两类光子总数相同态的系数相互关联起来。设两类光子总数为M的光子态$|n_1,n_2,M\rangle$，就有$|P\rangle$的一般表达式，

$$|P\rangle=|n_1,n_2,M\rangle=\sum_{l=0}^{M}i^l\sqrt{\frac{M!}{(M-l)!l!}}|n_1,n_2,M-l,l\rangle \tag{4.12}$$

证明：

---

[14] 亦可这样看：

$$\int d^3k\, f(\vec{k})e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}=F(\vec{x})=0\Leftrightarrow f(\vec{k})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3xF(\vec{x})e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}=0$$

[15] 于是，$\partial_\mu A_\mu^{(+)}$中只含有纵向和标量光子项。

[16] 此式不应理解发$a_3(\vec{k}),a_4(\vec{k})$、间不独立；而应理解为对$|P\rangle$态的限制，$a_3,a_4$间是彼此独立的。

$$(a_3 - ia_4)\left|n_1, n_2, M\right\rangle = \sum_{l=0}^{M-1} i^l \sqrt{\frac{M!}{(M-l)!l!}}\sqrt{M-l}\left|n_1, n_2, M-l-1, l\right\rangle$$
$$-i\sum_{l=0}^{M-1} i^l \sqrt{\frac{M!}{(M-l)!l!}}\left(-\sqrt{l}\right)\left|n_1, n_2, M-l, l-1\right\rangle \quad [17]$$

$$= \sum_{l=0}^{M-1} i^l \sqrt{\frac{M!}{(M-l-1)!l!}}\left|n_1, n_2, M-l-1, l\right\rangle$$
$$+ i\sum_{l'=0}^{M-1} i^{l'+1} \sqrt{\frac{M!}{(M-l'-1)!l'!}}\left|n_1, n_2, M-l'-1, l'\right\rangle = 0$$

将 $M = 0,1,2$ 各态具体写出来是：

$$\begin{cases} \left|n_1, n_2, 0\right\rangle = \left|n_1, n_2, 0, 0\right\rangle \\ \left|n_1, n_2, 1\right\rangle = \left|n_1, n_2, 1, 0\right\rangle + \left|n_1, n_2, 0, 1\right\rangle \\ \left|n_1, n_2, 2\right\rangle = \left|n_1, n_2, 2, 0\right\rangle + i\sqrt{2}\left|n_1, n_2, 1, 1\right\rangle - \left|n_1, n_2, 0, 2\right\rangle \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \end{cases} \quad [18]$$

由此可得

$$\left\langle n_1, n_2, M \middle| n_1, n_2, M\right\rangle = \sum_{ll'=0}^{M} (-)^l i^{l+l'} \sqrt{\frac{M!\cdot M!}{(M-l)!(M-l')!l!l'!}} \cdot \quad [19]$$
$$\cdot\left\langle n_1, n_2, M-l, l \middle| n_1, n_2, M-l', l'\right\rangle$$

$$= \sum_{l=0}^{M} (-)^l \frac{M!}{(M-l)!l!} = (1-1)^M = \begin{cases} 1 & \text{当} M = 0 \\ 0 & \text{当} M \neq 0 \end{cases}$$

于是，光子场的一般态矢可表示为

$$\left|\lambda\right\rangle = \sum_{n_1 n_2} B_{n_1 n_2 M}\left|n_1, n_2, M\right\rangle \quad [20]$$

---

[17] 注意：$a_4\left|n\right\rangle = -\sqrt{n}\left|n-1\right\rangle$

证：$a_4\left|n\right\rangle = a_4 \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a_4^\dagger\right)^n\left|0\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left[a_4, \left(a_4^\dagger\right)^n\right]\left|0\right\rangle = \frac{-n}{\sqrt{n!}}\left(a_4^\dagger\right)^{n-1}\left|0\right\rangle = -\sqrt{n}\left|n-1\right\rangle$

[18] 例如，只有如此混合起来的 $\left|n_1, n_2, 2\right\rangle$ 才能满足物理态的约束条件，但其模长仍为零！！

[19] $\left\langle n_1, n_2, M\right| = \sum_{l=0}^{M} (-i)^l \sqrt{\frac{M!}{(M-l)!l!}} \cdot \left\langle n_1, n_2, M-l, l\right|$，并注意到：

$$\left\langle n_1, n_2, M-l, l \middle| n_1, n_2, M-l, l\right\rangle = (-)^l$$

[20] 这个推广的 ***Maxwell*** 量子场状态空间包含三类矢量：**i**，不含纵向、标量光了——物理态，

这样，从上面结果可以得到

$$\langle\lambda|\lambda\rangle=\sum_{\substack{n_1'n_2'n_1'n_2'\\M\ M'}}B^*_{n_1n_2M}B_{n_1'n_2'M'}\langle n_1,n_2,M|n_1',n_2',M'\rangle=\sum_{n_1n_2M}\left|B_{n_1n_2M}\right|^2\langle n_1,n_2,M|n_1,n_2,M\rangle$$

$$=\sum_{n_1'n_2'n_1'n_2'}B^*_{n_1n_20}B_{n_1'n_2'0}\langle n_1,n_2,0|n_1',n_2',0\rangle=\sum_{n_1n_2}\left|B_{n_1n_20}\right|^2\langle n_1,n_2,0|n_1,n_2,0\rangle$$

这就是说，**含纵向光子、标量光子的态，其模长为零，是不可观测的非物理态；只有不含这两类光子的态，模长才不为零，是可观测的物理态。而且任何态的模长，等于其中所包含的 $M=0$ 物理态的模长，也就是说，任何态中所包含的 $M\neq0$ 非物理的态对该态的模长无贡献。换句话说，纵向光子和标量光子的允许（按约束条件）混合并不影响态矢的模长，态矢的模长仅由态矢中不含这两类光子、只含横向光子的态矢成分决定。于是，光子场所允许的一般态就成为，**

$$|\chi\rangle=\sum_{n_1n_2}B_{n_1n_20}|n_1,n_2,0\rangle$$

态矢的模长总是正的。

这样就证明了：**附加条件消除了负模态，保证了纵向自由度和类时自由度在物理上是不可观测量。**这一句话还为以下命题所证实：

$$\langle A|\Omega|A\rangle=\langle M=0|\Omega|M=0\rangle(=\langle P|\Omega|P\rangle)$$

证明：对 H 、$\vec{P}$ 是明显的，因为它们的表达式中包含了 $N_{\vec{k}^3}$ 、 $N_{\vec{k}^4}$ ，作用在后面态矢 $M\neq0$ 的成份上取出本征值之后，均由于 $\langle n_1,n_2,M|n_1,n_2,M\rangle=0$ （当 $M\neq0$ 时），从而只剩下受 $N_{\vec{k}^1}$ 、 $N_{\vec{k}^2}$ 作用的 $|n_1,n_2,0\rangle$ 之类的态。

IV，“*Schrödinger* 场”的二次量子化——逻辑结论，不古怪

满足约束条件；ii，含了 3、4 两类光子但满足条件；iii，含了 3、4 两类光子不满足条件。

1，“ Schrödinger 场”的“经典”场论

众所周知，依据大量实验事实，按照“公设+逻辑”思维模式，人们逐步构筑起非相对论量子力学，其中包括 **Schrödinger** 方程公设。现在换一种形式，将波函数看成“经典”的概率幅“场”，由设定的 **Lagrangian** 出发，按“经典”场论推演模式，也得到 **Schrödinger** 方程。

Lagrangian 框架。设 Lagrangian 密度[21]为：

$$\mathcal{L}_S = i\hbar\psi^*(\vec{r},t)\dot{\psi}(\vec{r},t) - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi - V\psi^*\psi \qquad (4.13)$$

这是复数场，所以一般说ψ,ψ^*相互独立。应用 **Hamiltonian 变分原理**，

$$\delta S = \delta\int d^4x\,\mathcal{L}_S\left(\psi,\partial_\lambda\psi,\psi^*,\partial_\lambda\psi^*\right) = 0$$

只对ψ^*进行变分，得 “**Schrödinger** 场”的 **Euler-Lagrange** 方程，

$$\partial_\lambda\frac{\partial\mathcal{L}_S}{\partial\left(\partial_\lambda\psi^*\right)} - \frac{\partial\mathcal{L}_S}{\partial\psi^*} = 0 \qquad (4.14a)$$

将所设 **Lagrangian** 密度代入，即得:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\psi + V\psi \qquad (4.14b)$$

得到这个“**经典概率幅场**”的场方程——**Schrödinger** 方程。**本来它是量子力学一个公设，现在将其等价地转换为关于 Lagrangian 的公设**。

正则框架。首先定义正则动量场。

[**定义**] 与场量$\psi(\vec{r},t)$对应的正则共轭动量场为

$$\pi(\vec{r},t) = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}(\vec{r},t)} = i\hbar\psi^*(\vec{r},t) \qquad (4.15a)$$

由于这种复标量场 **Lagrangian** 密度中不含$\psi^*(\vec{r},t)$的时间导数，所以

---

[21] 此 *Lagrangian* 密度不含相互作用项。尽管含了一个外势V，但它不代表场粒子之间的相互作用。

与另一独立场量$\psi^*(\vec{r},t)$对应的正则共轭动量场$\pi^*=\dfrac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}^*}=0$恒为零。说明"*Schrödinger* 场"只存在一对独立正则共轭变量（$\psi,\ \pi=i\hbar\psi^*$）[22]。于是 ***Hamiltonian*** 密度为

$$\mathcal{H}=\pi\dot{\psi}-\mathcal{L}=\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+V\psi^*\psi \qquad \textbf{(4.15b)}$$

对$\mathcal{H}$积分并对右边第一项作分部积分，得到这个场的 ***Hamiltonian*** H，

$$H=\int d\vec{r}\,\mathcal{H}=\int d\vec{r}\,\psi^*(\vec{r},t)\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V\right]\psi(\vec{r},t) \qquad \textbf{(4.15c)}$$

方括号内是单粒子量子力学的 ***Hamiltonian***。现在它是"经典的 *Schrödinger* 场$\psi(\vec{r},t)$"的 ***Hamiltonian***[23]。

按经典 ***Poisson*** 括号定义，求得场量ψ和ψ^*的"经典"泛函 ***Poisson*** 括号如下（注意是等时的）：

$$\left\{\psi(\vec{r},t),\psi^*(\vec{r}'',t)\right\}_{P.B}=\int d\vec{r}'\left\{\frac{\delta\psi(\vec{r},t)}{\delta\psi(\vec{r}',t)}\frac{\delta\psi^*(\vec{r}'',t)}{\delta\pi(\vec{r}',t)}-\frac{\delta\psi(\vec{r},t)}{\delta\pi(\vec{r}',t)}\frac{\delta\psi^*(\vec{r}'',t)}{\delta\psi(\vec{r}',t)}\right\}$$

利用泛函导数：

$$\frac{\delta\psi(\vec{r},t)}{\delta\psi(\vec{r}',t)}=\delta(\vec{r}-\vec{r}')\ ,\quad \frac{\delta\psi^*(\vec{r}'',t)}{\delta\pi(\vec{r}',t)}=\frac{1}{i\hbar}\delta(\vec{r}''-\vec{r}')$$

其余为零，代入积分中求得等时的"经典"泊松括号为：

$$\begin{aligned}&\left\{\psi(\vec{r},t),\psi^*(\vec{r}',t)\right\}_{P.B}=\frac{1}{i\hbar}\delta(\vec{r}-\vec{r}')\\&\left\{\psi(\vec{r},t),\psi(\vec{r}',t)\right\}_{P.B}=\left\{\psi^*(\vec{r},t),\psi^*(\vec{r}',t)\right\}_{P.B}=0\end{aligned} \qquad \textbf{(4.15d)}$$

同时，还得到这个"经典场"的正则变量的运动方程[24]：

---

[22]原则上，复标量场ψ,ψ^*相互独立，各自独立变分。场与共轭场应有两对$(\psi,\pi),(\psi^*,\pi^*)$。

[23] ***Klein-Gordon*** 场、***Dirac*** 场也类似。

[24] 注意已设定ψ和π是由它俩各自本身组成，是不显含t的，故无$\dfrac{\partial}{\partial t}$项。

$$\frac{d\psi(\vec{r},t)}{dt}=\{\psi(\vec{r},t),H(t)\}_{P.B.(\psi,\pi)}$$

另一个关于ψ^*的运动方程是不独立的，不必理会。

当然，上述概率幅场“经典”场论的演绎过程，实际等价于一次量子化公设，但却为下节二次量子化叙述提供了（并非必要的）铺垫。

2，“*Schrödinger* 场”按对易规则二次量子化

现在叙述第二个古怪，那就是不顾一切地将正则量子化方案用到这个“**Schrödinger** 场”上，看看对这个概率幅场进行“第二次量子化”，得到的“量子场”会是个什么结果。预先指出，这样做的最后结果是建立起了全同粒子的多体量子力学！

二次量子化方法由两条规定组成：其一，将普通场量函数替换为非对易的场算符（作用在二次量子化后系统的状态空间上），

$$\psi(\vec{r},t)\to\hat{\Psi}(\vec{r},t);\quad \pi(\vec{r},t)\to\hat{\Pi}(\vec{r},t) \tag{4.16a}$$

还有$\psi^*\to\hat{\Psi}^+$。这条规定是对场量进行“量子替换”，实质内容就是规定它们之间的非对易规则：将经典 *Poisson* 括号替换为量子 *Poisson* 括号（除 **Lagrangian** 密度外，就是此处引入 **Planck** 常数$\hbar$），

$$\{A,B\}_{P.B.}\Rightarrow\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A},\hat{B}\right] \tag{4.16b}$$

现在，这种“量子替换”产生如下等时对易关系：

$$\begin{aligned}&\left[\hat{\Psi}(\vec{r},t),\hat{\Psi}^+(\vec{r}',t)\right]=\delta(\vec{r}-\vec{r}')\\&\left[\hat{\Psi}(\vec{r},t),\hat{\Psi}(\vec{r}',t)\right]=\left[\hat{\Psi}^+(\vec{r},t),\hat{\Psi}^+(\vec{r}',t)\right]=0\end{aligned} \tag{4.16c}$$

显然，此处对易关系式是量子力学中 **Heisenberg** 基本对易关系$\left[x_i,p_j\right]=\delta_{ij}$向具有空间广延性的、无穷多自由度的场论情况的自然推

广——这时自由度的编号是位置矢量。**其二，维持原来“经典”场方程形式不变，只将其中（普通函数性质的）场量替换成场算符(也可以用场算符本身的运动方程求得，见下面 *Fermion* 叙述)。所以，二次量子化后的量子场方程和原先单粒子方程形式完全相同。于是有**

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\Psi}}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\hat{\Psi}(\vec{r},t)+V(\vec{r},t)\hat{\Psi}(\vec{r},t) \tag{4.16d}$$

第二条规定场算符作为时空函数的解析性质——时空传播规律。

以上就是对 *Schrödinger* 方程二次量子化的全过程。初看起来，这些手续很是古怪，不知其为何！但下面将严格证明：**这样做的结果就是从单粒子 *Schrödinger* 方程得到全同 *Boson* 多体 *Schrödinger* 方程。**就是说，原来单粒子的“经典”***Schrödinger*** 方程，经此手续转换，表面形式未变，但却已经是描述全同 ***Boson*** 多体 ***Schrödinger*** 方程。而且导出过程简捷，表达形式简明。因此，***Schrödinger*** 方程的二次量子化手续是严格逻辑证明了的，一点都不古怪。下面逐步阐明。

鉴于从 *Newton* 力学到 *Schrödinger* 方程已经实现了量子化[25]**，所以这次量子化就应当算是第二次量子化——这是名称的由来。**

最后强调指出，就目前 ***Schrödinger*** 场情况而言，所得到的“量子 ***Schrödinger*** 场”，在场量子之间并无相互作用——虽然各自都经受着外部势场 $V(\vec{r},t)$ 的作用。经过下节粒子数表象叙述之后，对此将看得更为清楚，因为 ***Hamiltonian*** 中只有单体算符，不存在两体或多体算符。这是由现在 ***Lagrangian*** 密度 $\mathscr{L}$ 的形式决定的。场量子间有

[25] 一次量子化主要内容见前，为 $\vec{p}\to -i\hbar\nabla$，$E\to i\hbar\partial/\partial t$，量子化条件 $[x,p_x]=i\hbar$。

相互作用的讨论见下面第 **IV** 节。

3， “*Schrödinger* 场”按 *Jordan-Wigner* 规则二次量子化

现在使用反对易规则对“经典”的“*Schrödinger* 场”实施二次量子化，仍然按照正则量子化方案进行。**以 *Jordan-Wigner* 量子化规则替代经典 *Poisson* 括号**[26]，即

$$\begin{aligned}&\left\{\hat{\Psi}(\vec{r},t),\hat{\Psi}^{+}(\vec{r}',t)\right\}=\delta(\vec{r}-\vec{r}')\\&\left\{\hat{\Psi}(\vec{r},t),\hat{\Psi}(\vec{r}',t)\right\}=\left\{\hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t),\hat{\Psi}^{+}(\vec{r}',t)\right\}=0\end{aligned}\qquad(4.17a)$$

这里$\left\{\hat{A},\hat{B}\right\}=\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}$。**注意，这时场算符运动方程中的经典 *Poisson* 括号仍替换为量子 *Poisson* 括号，即正比于对易子，不能正比于反对易子**。这是因为，量子化后的 ***Hamiltonian*** 是时间演化算符的生成元，于是，对任意不显含时间的场算符，其时间演化及导数为

$$\hat{\Omega}(t)=e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{\Omega}(0)e^{-i\hat{H}t/\hbar}\ \rightarrow\ \frac{d\hat{\Omega}(t)}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\Omega}(t),\hat{H}\right]\qquad(4.17b)$$

这里结果与量子化规则无关。应当指出，为了得到量子化后场算符的运动方程，既可以按二次量子化假设直接写出（如 ***Boson*** 情况），也可以按上式计算得到。比如，现在采用上式来推导。注意用反对易分解$[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]=\{\hat{A},\hat{B}\}\hat{C}-\hat{B}\{\hat{A},\hat{C}\}$，得：

$$\dot{\hat{\Psi}}(\vec{r},t)=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\Psi}(\vec{r},t),\ \hat{H}(t)\right]=\int d\vec{r}'\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\Psi}(\vec{r},t),\ \hat{\Psi}^{+}(\vec{r}',t)H'_{single}\hat{\Psi}(\vec{r}',t)\right]$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\int d\vec{r}'\left[\left\{\hat{\Psi}(\vec{r},t),\ \hat{\Psi}^{+}(\vec{r}',t)\right\}H'_{single}\hat{\Psi}(\vec{r}',t)-\hat{\Psi}^{+}(\vec{r}',t)H'_{single}\left\{\hat{\Psi}(\vec{r},t),\ \hat{\Psi}(\vec{r}',t)\right\}\right]$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\int d\vec{r}'\delta(\vec{r}-\vec{r}')H'_{single}\hat{\Psi}(\vec{r}',t)=\frac{1}{i\hbar}H_{single}(\vec{r},t)\hat{\Psi}(\vec{r},t)$$

---

[26] *Z. Phys.*，47, 631(1928)。

得到和单粒子 ***Schrödinger*** 方程形式相同的场算符 $\hat{\Psi}(\vec{r},t)$ 的运动方程：

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\Psi}(\vec{r},t)}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V(\vec{r},t)\right)\hat{\Psi}(\vec{r},t) \qquad \textbf{(4.17c)}$$

就是说，按正则量子化方案，用这种反对易规则对该场进行量子化的结果，只是在原先单粒子 ***Schrödinger*** 方程中，将波函数代以满足反对易关系的场算符。下面将表明，这是全同 ***Fermion*** 多体量子力学。

4，将两种二次量子化结果转入粒子数表象

为了揭示上面这两种二次量子化后的“***Schrödinger*** 量子场”蕴涵的物理内容，先转入粒子数表象。

第一步是寻求适当的正交归一本征函数组对场算符 $\hat{\Psi}$ 的时空变数作展开。例如，对一个大而均匀系统，很自然采用满足周期边界条件的箱归一平面波组作为展开基矢；而对于原子中相互作用的电子系统，通常就用单粒子库仑波函数完备集合作为展开基矢；对晶格点阵中运动的粒子，方便的选择是适当周期势中的 ***Bloch*** 波函数完备集。

无论哪种选择，一旦选定，粒子数表象的“粒子”概念即被赋予相应模式的具体物理含义，是该含义下的“准粒子”。

为简单起见，限于相互作用 V 不显含 t 的情况，这时“经典” ***Schrödinger*** 方程解的完备集是：

$$\left\{\psi_k(\vec{r})e^{-iE_k t/\hbar}\right\},\quad \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V(\vec{r})\right)\psi_k(\vec{r})=E_k\psi_k(\vec{r}) \qquad \textbf{(4.18a)}$$

这里 k 表示完备力学量组的量子数集合。它们取值不同表示粒子状态或运动模式不同。通常这个函数族构成正交归一完备族，

$$\int dv\,\psi_k(\vec{r})\psi^*_{k'}(\vec{r})=\delta_{kk'}\,,\quad \sum_k\psi_k(\vec{r})\psi^*_k(\vec{r}')=\delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

于是可以用这组函数族展开场算符$\hat{\Psi}(\vec{r},t)$和$\hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t)$：

$$\hat{\Psi}(\vec{r},t)=\sum_k \hat{a}_k\psi_k(\vec{r})e^{-iE_k t/\hbar} \quad , \quad \hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t)=\sum_k \hat{a}_k^{+}\psi^{*}{}_k(\vec{r})e^{iE_k t/\hbar} \qquad (4.18b)$$

这里$\hat{a}_k,\hat{a}_k^{+}$是量子系数，体现场算符$\hat{\Psi}(\vec{r},t)$、$\hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t)$的非对易代数性质。实际上，利用$\{\psi_k(\vec{r})\}$正交归一性可以反解出这两个量子系数，

$$\hat{a}_k=\int d\vec{r}\,\hat{\Psi}(\vec{r},t)\psi_k^{*}(\vec{r})e^{iE_k t/\hbar} \quad , \quad \hat{a}_k^{+}=\int d\vec{r}\,\hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t)\psi_k(\vec{r})e^{-iE_k t/\hbar} \qquad (4.18c)$$

用对易子进行量子化的方案。根据$\hat{\Psi},\hat{\Psi}^{+}$的对易关系，容易得到$\hat{a}_k,\hat{a}_k^{+}$的对易关系

$$\begin{aligned}\left[\hat{a}_k,\hat{a}_{k'}^{+}\right]&=\int d\vec{r}d\vec{r}'\left[\hat{\Psi}(\vec{r},t),\hat{\Psi}^{+}(\vec{r}',t)\right]\psi_{k'}(\vec{r}')\psi_k^{*}(\vec{r})e^{i(E_k-E_{k'})t/\hbar}\\&=\int d\vec{r}d\vec{r}'\,\delta\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)\psi_{k'}(\vec{r}')\psi_k^{*}(\vec{r})e^{i(E_k-E_{k'})t/\hbar}\\&=\int d\vec{r}\,\psi_{k'}(\vec{r})\psi_k^{*}(\vec{r})e^{i(E_k-E_{k'})t/\hbar}=\delta_{kk'}\end{aligned}$$

其余计算类似，总计得到

$$\left[\hat{a}_k,\hat{a}_{k'}^{+}\right]=\delta_{kk'}\ ,\ \left[\hat{a}_k,\hat{a}_{k'}\right]=\left[\hat{a}_k^{+},\hat{a}_{k'}^{+}\right]=0 \qquad (4.18d)$$

这里强调指出，“*Schrödinger* 场”二次量子化时，场算子$\hat{\Psi}$展开式中只含湮灭算符，$\hat{\Psi}^{+}$中只含产生算符。这与 ***Klein-Gordon*** 场不同。

下面用$\hat{a}_k$、$\hat{a}_k^{+}$表示 ***Hamiltonian*** 和粒子数算符：

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\int d\vec{r}\,\mathscr{H}=\int d\vec{r}\,\hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t)\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V\right]\hat{\Psi}(\vec{r},t)=\int d\vec{r}\,\hat{\Psi}^{+}\left(\vec{r},t\right)\sum_k\hat{a}_k E_k\psi_k(\vec{r})e^{iE_k t/\hbar}\\&=\sum_{kk'}\hat{a}_{k'}{}^{+}\hat{a}_k E_k e^{i(E_{k'}-E_k)t/\hbar}\int d\vec{r}\,\psi_{k'}^{*}(\vec{r})\psi_k(\vec{r})\\ \hat{N}&=\int d\vec{r}\,\hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t)\hat{\Psi}(\vec{r},t)=\sum_{kk'}\hat{a}_k{}^{+}\hat{a}_{k'}e^{i(E_{k'}-E_k)t/\hbar}\int d\vec{r}\,\psi_{k'}^{*}(\vec{r})\psi_k(\vec{r})\end{aligned}$$

利用$\left\{\psi_k\left(\vec{r}\right)e^{-iE_k t/\hbar}\right\}$的正交归一性，有

$$\hat{H}=\sum_k E_k\hat{a}_k{}^{+}\hat{a}_k\ , \quad \hat{N}=\sum_k\hat{a}_k{}^{+}\hat{a}_k=\sum_k\hat{N}_k \qquad (4.18e)$$

这里$\hat{N}_k=\hat{a}_k{}^{+}\hat{a}_k$为$k$模态的粒子数算符。于是可将$\hat{H}$系统看成满足对易规则的所有无相互作用$k$模态准粒子的集合。由于

$$\left[\hat{H},\hat{N}_k\right]=0,\quad \left[\hat{N}_k,\hat{N}_l\right]=0\quad \forall k,l$$

每个k模态的粒子数n_k都是不依赖于时间的运动常数(当然,各个k模态占据数可能不同，由初始条件决定）。从而$\left\{\hat{H},\hat{N}_k\right\}$组成一个对易的完备力学量组，共同本征态是

$$\left\{\left|n_1,n_2,\cdots\cdots\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{(n_1!\cdots n_k!\cdots)}}\left(\hat{a}_1^+\right)^{n_1}\cdots\left(\hat{a}_k^+\right)^{n_k}\cdots\left|0\right\rangle,\ \forall n_k\right\}\tag{4.19}$$

此式表明，态中有n_k个场量子在k模态上，但却未说明这n_k个场量子谁是谁。实际上，由于同一个k模态内各个$\hat{a}_k^+$之间的全同性，这n_k个场量子不可分辨，这要求态矢对它们置换是对称的。如果某过程中有量子态跃迁，n_k不是好量子数，由于场量子间对易而无法分辨谁参与跃迁交换。**总之，这里的理论已经自动符合于全同性原理。**

这组完备基矢称作粒子数表象基矢，共同撑开粒子数表象。它们任意线性组合构成一个富于粒子图象的 *Boson* 的 *Fock* 空间 [27]。

这里需要附带指出，**虽然粒子数表象与二次量子化过程关系密切，但不要将粒子数表象称作二次量子化表象**。因为，一次量子化的谐振子也可以采用粒子数表象来表示 [28]。

用反对易子进行量子化的方案。与上面 *Boson* 类似，有$\left\{\psi_k(\vec{r})e^{-iE_kt/\hbar}\right\}$，以及

$$\begin{cases}\hat{\Psi}(\vec{r},t)=\sum_k\hat{b}_k\psi_k(\vec{r})e^{-iE_kt/\hbar}\\ \hat{\Psi}^+(\vec{r},t)=\sum_k\hat{b}_k^+\psi_k^*(\vec{r})e^{iE_kt/\hbar}\end{cases}\qquad\begin{cases}\hat{b}_k=\int d\vec{r}\,\hat{\Psi}(\vec{r},t)\psi_k^*(\vec{r})e^{iE_kt/\hbar}\\ \hat{b}_k^+=\int d\vec{r}\,\hat{\Psi}^+(\vec{r},t)\psi_k(\vec{r})e^{-iE_kt/\hbar}\end{cases}\tag{4.20a}$$

根据$\hat{\Psi},\hat{\Psi}^+$的反对易关系，容易导出$\hat{b}$、$\hat{b}^+$的反对易关系如下：

---

[27] 将全同多体算符转入粒子数表象的较简单的计算可见：张永德，朱长虹，《大学物理》，1989 年第 12 期，P.17。

[28] 见张永德，《量子力学(第二版)》，北京：科学出版社，2008 年，P.144。

$$\left\{\hat{b}_k,\hat{b}_{k'}^+\right\}=\delta_{kk'}\text{，}\quad \left\{\hat{b}_k,\hat{b}_{k'}\right\}=\left\{\hat{b}_k^+,\hat{b}_{k'}^+\right\}=0 \tag{4.20b}$$

接着，用$\hat{b}_k$、$\hat{b}_k{}^+$去表示$\hat{H}$和$\hat{N}$，

$$\hat{H}=\int d\bar{r}\hat{\Psi}^+(\bar{r},t)\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu}\Delta+V\right]\hat{\Psi}(\bar{r},t)=\int d\bar{r}\sum_{kk'}\hat{b}_k^+\psi_k^*(\bar{r})e^{i(E_k-E_{k'})t/\hbar}E_{k'}\hat{b}_{k'}\psi_{k'}(\bar{r})$$

所以有

$$\hat{H}=\sum_k E_k\hat{b}_k^+\hat{b}_k,\quad \hat{N}=\sum_k\hat{b}_k^+\hat{b}_k=\sum_k\hat{N}_k \tag{4.20c}$$

但由于$\hat{b}$、$\hat{b}^+$间的反对易关系，第k个模态的粒子数算符$\hat{N}_k=\hat{b}_k^+\hat{b}_k$的本征值只能取 0 或 1。

证明： 由于$\left\{\hat{b}_k,\hat{b}_{k'}\right\}=\left\{\hat{b}_k^+,\hat{b}_{k'}^+\right\}=0\Rightarrow b_k^2=\left(b_k^+\right)^2=0$，所以

$$\hat{N}_k^2=\hat{b}_k^+\hat{b}_k\hat{b}_k^+\hat{b}_k=\hat{b}_k^+(1-\hat{b}_k^+\hat{b}_k)\hat{b}_k=\hat{b}_k^+\hat{b}_k=\hat{N}_k$$

于是$\hat{N}_k$只有两个本征值 0、1。这体现了 *Pauli* 不相容原理。 证毕。

显然，$\left\{\hat{H},\hat{N}_k,\ \forall k\right\}$构成可对易算符完备组，它们的共同本征态族可作为正交归一完备基矢，

$$\left|n_1,n_2,\cdots\cdots\right\rangle=\left(\hat{b}_1^+\right)^{n_1}\left(\hat{b}_2^+\right)^{n_2}\cdots\left|0\right\rangle,\ \forall n_k=0,1 \tag{4.21}$$

撑开 *Fermion* 粒子数表象，线性叠加集合构成 *Fermion-Fock* 空间。

总合起来，转入粒子数表象后清楚地看到，**无论 *Boson* 还是 *Fermion* 情况，该量子场描述一组总数固定的全同 *Boson*（*Fermion*）集合。并且，这些 *Boson*（*Fermion*）彼此无相互作用（除对称和反称化而来的交换作用之外）——尽管各自都受着外场V作用而处于束缚态或非束缚态。如前所说，实际上这是将“$\psi_k(\bar{r})e^{-iE_kt/\hbar}$认作一个 *Bose*（*Fermi*）性的准粒子——*Bose*（*Fermi*）性量子场的量子，对它们进行产生和湮灭。” 但是，根据目前非相对论量子力学 *Hamiltonian* 的构造原则，产生和湮灭过程必定相伴相随，使粒子数守恒。所以，**

说是“产生”、“湮灭”，其实只是粒子状态的跃迁。只不过由于这些场量子是全同的，湮灭前和产生后都要实行对称化（反称化）量子纠缠，成为“你中有我，我中有你”，原则上不可以分辨。

5，与全同多体量子力学的等价性——逻辑结论，所以不古怪

将上述结果转入坐标表象，并分开 ***Boson*** 和 ***Fermion*** 叙述。

i，现在证明：上面采用对易规则进行二次量子化所得的量子场，其动力学方程即为全同 *Boson* 多体 *Schrödinger* 方程。于是，这个二次量子化量子场本质上即为全同 *Boson* 多体量子力学。

证明：证明由 **4** 个命题 A、B、C、D 组成。

［命题 A］$\hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t)$ 和 $\hat{\Psi}(\vec{r},t)$ 分别是在 t 时刻在 $\vec{r}$ 处产生一个和湮灭一个场量子的算符。

证明 A：首先注意，由 $\hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t)$ 展开式知，它是关于所有模 $\hat{a}_k^{+}$ 的以特定系数的叠加态。现在表明，它作用到粒子数表象任何态矢得到的新态，其总粒子数比原先多 **1**。这可以用粒子数算符来检查。假定原先为

$$\hat{N}\left|n_1,\cdots,n_k,\cdots\right\rangle = N\left|n_1,\cdots,n_k,\cdots\right\rangle$$

则有

$$\hat{N}\left(\hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t)\left|n_1,\cdots,n_k,\cdots\right\rangle\right) = \int d\vec{r}'\,\hat{\Psi}^{+}(\vec{r}',t)\hat{\Psi}(\vec{r}',t)\hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t)\left|n_1,\cdots,n_k,\cdots\right\rangle$$

$$= \int d\vec{r}'\,\hat{\Psi}^{+}(\vec{r}',t)\left(\hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t)\hat{\Psi}(\vec{r}',t) + \delta(\vec{r}-\vec{r}')\right)\left|n_1,\cdots,n_k,\cdots\right\rangle$$

$$= \left(\hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t)\hat{N} + \hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t)\right)\left|n_1,\cdots,n_k,\cdots\right\rangle = (N+1)\left(\hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t)\left|n_1,\cdots,n_k,\cdots\right\rangle\right)$$

进一步，可以证明，$\hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t)$ 的物理意义是 t 时刻 $\vec{r}$ 处产生一个场量子的算符。按照定义，有

$$\hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t) = \sum_k \psi^{*}{}_k(\vec{r})e^{iE_k t/\hbar}\cdot\hat{a}_k^{+}$$

此式左边的含意由右边解释作为，以带有叠加系数$\psi_k^*(\bar r)\exp(iE_k t/\hbar)$）的方式添加一个$\hat a_k^+$粒子，并对所有模态求和。但已知$\hat a_k^+$的作用是产生一个处于$\psi_k(\bar r)$模态的场量子，于是在点$\bar r'$处找到此新生粒子的概率幅为$\psi_k(\bar r')\exp(-iE_k t/\hbar)$。所以在点$\bar r'$处找到由$\hat a_k^+$所添加的粒子的总概率幅等于新生概率幅$\psi_k(\bar r')e^{-iE_k t/\hbar}$和原有叠加系数$\psi_k^*(\bar r)e^{iE_k t/\hbar}$的乘积。于是，整个$\hat\Psi^+(\bar r,t)$总效果，也即不管什么模态$k'$，只问$\bar r'$处有无粒子的总概率幅，将是这些乘积对模态$k'$求和，

$$\sum_{k'}\psi_{k'}^*(\bar r)e^{iE_{k'}t/\hbar}\psi_{k'}(\bar r')e^{-iE_{k'}t/\hbar}=\sum_k\psi_k^*(\bar r)\psi_k(\bar r')=\delta(\bar r-\bar r')$$

换句话说，只就算符$\hat\Psi^+(\bar r,t)$本身作用而言（不计后面所乘的任意态矢），它把添加一个粒子的概率幅全都加在$\bar r$点了。这就证明了$\hat\Psi^+(\bar r,t)$可以作如上解释。对$\hat\Psi(\bar r,t)$的论证类似。 证毕。

于是，如果说术语$\hat a_k^+$、$\hat a_k$富于粒子图象的话，术语$\hat\Psi^+(\bar r,t)$、$\hat\Psi(\bar r,t)$就富于量子场图象，称它们为场算符是理所当然的。现在，引入定域于某个体积v的、含时的“**定域粒子数算符**”$\hat N_v$[29]：

$$\hat N_v\equiv\int_v d\bar r\,\hat\Psi^+(\bar r,t)\hat\Psi(\bar r,t)$$

积分限于某体积v。为了说明此算符物理意义，有

[命题 B]：
$$\begin{cases}\hat N_v\hat\Psi^+(\bar r,t)=\hat\Psi^+(\bar r,t)(\hat N_v+1) & \bar r\in v\\ \hat N_v\hat\Psi^+(\bar r,t)=\hat\Psi^+(\bar r,t)\hat N_v & \bar r\notin v\end{cases}$$

证明 B：$\left[\hat N_v,\hat\Psi^+(\bar r,t)\right]=\int_v d\bar r'\left[\hat\Psi^+(\bar r',t)\hat\Psi(\bar r',t),\hat\Psi^+(\bar r,t)\right]$

[29] 将$\hat\Psi^+(\bar r,t)$、$\hat\Psi(\bar r,t)$的展开式代入此积分可知，由于$\int_v d\bar r\psi_k(\bar r)\psi^*_{k'}(\bar r)\neq\delta_{kk'}$，从而因子$e^{i(E_k-E_{k'})t/\hbar}$不能消去，于是$\hat N_v$一般含$t$。物理意义是明白的：就有限体积$v$而言，$\psi(\bar r,t)$随$t$演化并叠加的结果造成概率云的变动。

$$=\int_v d\vec r'\,\hat\Psi^+(\vec r',t)\delta(\vec r-\vec r')=\begin{cases}\hat\Psi^+(\vec r,t) & \vec r\in v\\ 0 & \vec r\notin v\end{cases}$$

此结果物理意义很明显：若$\hat\Psi^+(\vec r,t)$所增加的那个粒子在v内，则用$\hat N_v$检查时将发现增加一个粒子；若不在v内，$\hat N_v$本征值不变。

[命题C]：N个全同 Boson 系统坐标表象基矢用场算符构造即为

$$\left|\vec r_1,\vec r_2,\cdots,\vec r_N,t\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{N!}}\hat\Psi^+(\vec r_1,t)\hat\Psi^+(\vec r_2,t)\cdots\hat\Psi^+(\vec r_N,t)\left|0\right\rangle$$

证明C：先假定态矢中各$\vec r_k$均不相同。于是可分别构造$\hat N_{v_1},\cdots,\hat N_{v_N}$，让每个$v_K$足够小，小到只包含$\vec r_k$在内。分别用每个$\hat N_{v_k}$作$N$次检查，每个$\hat N_{v_k}$只与对应$\vec r_k$点附近的$\hat\Psi^+(\vec r_k,t)$交换时出一个$\hat\Psi^+(\vec r_k,t)$；而与其他$\hat\Psi^+(\vec r_i,t)$ $(\forall i\neq k)$均可交换直至$\hat N_{v_k}\left|0\right\rangle=0$。这样，用每个$\hat N_{v_k}$作用的结果确实可以发现这个态分别是它的本征值为 1 的本征态。

如果$\vec x_k$中有相重的，例如$\vec r_k=\vec r_l$两个位置相重，则用$\hat N_{v_l}$作用时，和其他$\hat\Psi^+$均可交换，直到这两个$\hat\Psi^+(\vec r_k,t)$、$\hat\Psi^+(\vec r_l,t)$之前，与它们的交换分别出现一个$\hat\Psi^+(\vec r_k,t)$和$\hat\Psi^+(\vec r_l,t)$，加起来，说明这个态是$\hat N_{v_k}$的本征值为 2 的本征态，等等。　　　　证毕。

最后，**[命题D]：上述基矢组是正交归一的。**

证明D：

$$\left\langle\vec r_1',\cdots,\vec r_N'\middle|\vec r_1,\cdots,\vec r_N\right\rangle=\frac{1}{N!}\left\langle0\right|\hat\Psi(\vec r_N',t)\cdots\hat\Psi(\vec r_1',t)\cdot\hat\Psi^+(\vec r_1,t)\cdots\hat\Psi^+(\vec r_N,t)\left|0\right\rangle$$

$$=\frac{1}{N!}\left\langle0\right|\hat\Psi(\vec r_N',t)\cdots\hat\Psi(\vec r_2',t)\left\{\delta(\vec r_1'-\vec r_1)+\hat\Psi^+(\vec r_1,t)\hat\Psi(\vec r_1',t)\right\}\hat\Psi^+(\vec r_2,t)\cdots\hat\Psi^+(\vec r_N,t)\left|0\right\rangle$$

$$=\frac{1}{N!}\left\langle0\right|\hat\Psi\left(\vec r_{N'}t\right)\cdots\hat\Psi\left(\vec r_{2'}t\right)\left\{\delta\left(\vec r_{1'}-\vec r_1\right)\hat\Psi^+\left(\vec r_2t\right)+\delta\left(\vec r_{1'}-\vec r_2\right)\hat\Psi^+\left(\vec r_1t\right)+\right.$$

$$\left.+\hat\Psi^+\left(\vec r_1t\right)\hat\Psi^+\left(\vec r_2t\right)\hat\Psi\left(\vec r_{1'}t\right)\right\}\hat\Psi^+\left(\vec r_3t\right)\cdots\hat\Psi^+\left(\vec r_Nt\right)\left|0\right\rangle$$

$$=\cdots$$

最后即得

$$\langle \vec{r}_1',\cdots,\vec{r}_N' | \vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N \rangle = \frac{1}{N!}\sum_P P\delta(\vec{r}_1'-\vec{r}_{P_1})\delta(\vec{r}_2'-\vec{r}_{P_2})\cdots\delta(\vec{r}_N'-\vec{r}_{P_N})$$

这里 $P_1,P_2,\cdots,P_N = 1,2,\cdots,N$ 。P 是对它们全体取值的一种置换，求和对所有可能的 P 进行，这共有 $N!$项。最后结果对$\{\vec{r}_k\}$和$\{\vec{r}_k'\}$都是对称的。这是由于各个$\hat{\Psi}^+$之间和各个$\hat{\Psi}$之间对易。对此结果进行积分，即

$$\int\cdots\int d\vec{r}_1'\cdots\vec{r}_N' \langle \vec{r}_1',\cdots,\vec{r}_N',t | \vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N,t \rangle = 1$$

这些是单粒子结果$\langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$和$\int d\vec{r}' \langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle = 1$的简单推广。　证毕。

根据[命题 A,B,C,D]，利用这组坐标表象基矢，很容易将前面粒子数表象结果转入 *Schrödinger* 表象，从而更清楚地看出所说的等价性。现在，记粒子数表象基矢的波函数为（$\sum_{i=1}^{k} n_i = N$）：

$$\Phi^{(N)}_{n_1,n_2,\cdots}(\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N,t) \equiv \langle \vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N,t | n_1,n_2,\cdots,n_k \rangle$$

它的物理意义是：**模平方给出当 n_1 个粒子处在$\psi_1(\vec{r})$、n_2 个粒子处在$\psi_2(\vec{r})$、……时，分别在$\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N$处找到这 N 个全同粒子的概率**。将场算符$\hat{\Psi}(\vec{r}_1,t)$的 *Schrödinger* 方程厄米共轭，得到$\hat{\Psi}^+(\vec{r}_1,t)$的方程：

$$-i\hbar\frac{\partial \hat{\Psi}^+(\vec{r}_1,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_1 + V(\vec{r}_1,t)\right)\hat{\Psi}^+(\vec{r}_1,t)$$

乘以$\hat{\Psi}^+(\vec{r}_2,t),\cdots,\hat{\Psi}^+(\vec{r}_N,t)$；对$\hat{\Psi}^+(\vec{r}_2,t)$的 *Schrödinger* 方程也类似处理，等等。将所得 N 个方程全加起来，再乘以真空态$|0\rangle$，即得：

$$-i\hbar\frac{\partial |\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N,t\rangle}{\partial t} = \sum_{k=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_k + V(\vec{r}_k,t)\right)|\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N,t\rangle$$

再乘以$\langle n_1,n_2,\cdots|$，取复数共轭，即得：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi^{(N)}_{n_1,n_2,\cdots}(\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N,t) = \sum_{k=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_k + V(\vec{r}_k,t)\right)\Phi^{(N)}_{n_1,n_2,\cdots}(\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N,t) \qquad \textbf{(4.22)}$$

由$\hat{\Psi}^+(\vec{r}_k,t)$的相互对易可以推出$|\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N,t\rangle$关于$\vec{r}_k$之间是对称的，从而

$\Phi^{(N)}_{n_1,n_2,\cdots}(\vec r_1,\cdots,\vec r_N,t)$对于$\vec r_k$之间也是对称的。

至此就严格地证明了：“*Schrödinger* 场”按照对易规则进行第二次量子化，结果就是总粒子数 *N* 恒定的全同 *Boson* 多体 *Schrödinger* 方程。由于原方程只有单体算符，*N* 个 *Boson* 之间并无相互作用。

当然，也可以根据$\Phi^{(N)}_{n_1,n_2,\cdots}(\vec r_1,\cdots,\vec r_N,t)$的定义求出下式：

$$\Phi^{(N)}_{n_1,n_2,\cdots}(\vec r_1,\cdots,\vec r_N,t)=\frac{1}{\sqrt{N!n_1!n_2!\cdots}}\sum_P P\psi_{P_1}(\vec r_1,t)\psi_{P_2}(\vec r_2,t)\cdots\psi_{P_N}(\vec r_N,t)\qquad(4.23)$$

这里$(P_1,\cdots,P_N)\in(n_1,\cdots,n_k)$，从而换个角度证明这种等价性。

ii，其次证明：**前面采用反对易规则进行二次量子化所得的量子场，其动力学方程即为全同 *Fermion* 多体 *Schrödinger* 方程。于是，这个二次量子化的量子场本质上即为全同 *Fermion* 多体量子力学。证明也分为 4 部分。**但为简明，略证对应于 ***Boson*** 的[命题B']。

[命题A']，场算符$\hat\Psi(\vec r,t)$和$\hat\Psi^+(\vec r,t)$的物理意义仍是在t时刻向此量子场湮灭和产生一个位于$\vec r$的场量子。

证明A'：只要注意反对易，大体照搬 ***Boson*** 证明。下面稍为改变形式，用箱归一化叙述。考虑箱中平面波态完全组，归一化波函数为，

$$\left\{\psi_{\vec P}(\vec r)=\frac{1}{\sqrt V}e^{i\vec P\cdot\vec r/\hbar}\right\},\quad P_x=\frac{n\pi\hbar}{a}，(n_x=0,\pm1,\pm2,\cdots)，abc=V\quad(4.24a)$$

产生算符$a^+_{\vec PS}$向归一化箱体里增加一个动量为$\vec P$、自旋指向为s的粒子；而$a_{\vec PS}$则相反，从箱体中移走这样一个粒子。在点$\vec r'$找到由$a^+_{\vec PS}$所增加的粒子的概率幅为$e^{i\vec P\cdot\vec r'/\hbar}\big/\sqrt V$。现在，$\psi^+_S(\vec r)\equiv\sum_{\vec P}e^{-i\vec P\cdot\vec r/\hbar}a^+_{\vec PS}\Big/\sqrt V$的作用是以叠加系数$e^{-i\vec P\cdot\vec r/\hbar}\big/\sqrt V$向给定动量态成份增加一个粒子。于是在$\vec r'$点找到由$\psi^+_S(\vec r)$所增加的粒子的总概率幅将是叠加系数$e^{-i\vec P\cdot\vec r/\hbar}\big/\sqrt V$与增

加粒子在$\vec{r}'$点概率幅$e^{i\vec{P}\cdot\vec{r}'/\hbar}/\sqrt{V}$的乘积，再求和。最终，总概率幅为

$$\sum_{\vec{P}}\frac{1}{\sqrt{V}}e^{-i\vec{P}\cdot\vec{r}/\hbar}\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{P}\cdot\vec{r}'/\hbar}=\delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

这就是说，$\psi_S^+(\vec{r})$把增加一个粒子的概率幅全部加在点$\vec{r}$处了。因此，$\psi_S^+(\vec{r})$的物理作用是在点$\vec{r}$处增加一个自旋指向为s的粒子。类似地

$$\psi_S(\vec{r})\equiv\sum_{\vec{P}}\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{P}\cdot\vec{r}/\hbar}a_{\vec{P}S} \tag{4.24b}$$

的物理作用是在点$\vec{r}$处湮灭一个自旋指向为s的粒子。　　　　证毕。

[命题C']：N 个全同 Fermion 系统的正交归一坐标表象基矢可用场算符构造如下 [30]：

$$\left|\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N,t\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\Psi}^+(\vec{r}_1,t)\hat{\Psi}^+(\vec{r}_2,t)\cdots\hat{\Psi}^+(\vec{r}_N,t)\left|0\right\rangle \tag{4.25a}$$

证明C'：由于

$$\left[\hat{N}_v,\hat{\Psi}^+(\vec{r},t)\right]=\int_v d\vec{r}'\,\hat{\Psi}^+(\vec{r}',t)\left\{\hat{\Psi}(\vec{r}',t),\hat{\Psi}^+(\vec{r},t)\right\}$$

$$=\int_v d\vec{r}'\,\hat{\Psi}^+(\vec{r}',t)\delta(\vec{r}-\vec{r}')=\begin{cases}\hat{\Psi}^+(\vec{r},t), & \vec{r}\in v\\ 0 & ,\ \vec{r}\notin v\end{cases} \tag{4.25b}$$

这结果和 *Boson* 情况一样。于是用$\hat{N}_v$检查的那段叙述可以照搬过来。而且由于态矢对$\vec{r}_k$为反对称的，不存在相重合的位置。

[命题D'] 这套基矢是正交归一的。

证明D'：和 *Boson* 的也相似，只需注意由反对易造成的负号。这只要注意

$$\cdots\hat{\Psi}(\vec{r}_2',t)\hat{\Psi}(\vec{r}_1',t)\hat{\Psi}^+(\vec{r}_1,t)\cdots=\cdots\hat{\Psi}(\vec{r}_2',t)\left\{\delta(\vec{r}_1'-\vec{r}_1)-\hat{\Psi}^+(\vec{r}_1,t)\hat{\Psi}(\vec{r}_1',t)\right\}\cdots$$

这里与 *Boson* 情况不同，括号内第二项是负号。于是比如，盯住含

[30] 类似于 *Boson* 情况，对相对论性场方程，构造这种完全定域化基矢原则上是不可能的。

$\delta(\vec{r}_1'-\vec{r}_1)$项，由左向右接着以$\hat{\Psi}(\vec{r}_2',t)$作用，如它和$\hat{\Psi}^+(\vec{r}_2,t)$变为$\delta(\vec{r}_2'-\vec{r}_2)$即不出负号；若不如此，反称交换越过$\hat{\Psi}^+(\vec{r}_2,t)$和右边$\hat{\Psi}^+(\vec{r}_3,t)$作用给出$\delta(\vec{r}_2'-\vec{r}_3)$，就出一负号。即$(1'1)(2'2)$为正，$(1'1)(2'3)$为负等等。于是

$$\langle \vec{r}_1',\cdots,\vec{r}_N',t|\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N,t\rangle=\frac{1}{N!}\langle 0|\hat{\Psi}(\vec{r}_N',t)\cdots\hat{\Psi}(\vec{r}_1',t)\cdot\hat{\Psi}^+(\vec{r}_1,t)\cdots\hat{\Psi}^+(\vec{r}_N,t)|0\rangle$$

$$=\frac{1}{N!}\sum_P(-1)^{[P]}P\delta(\vec{r}_1'-\vec{r}_{P_1})\delta(\vec{r}_2'-\vec{r}_{P_2})\cdots\delta(\vec{r}_N'-\vec{r}_{P_N})$$

$$=\frac{1}{N!}\begin{vmatrix}\delta(\vec{r}_1'-\vec{r}_1) & \delta(\vec{r}_2'-\vec{r}_1) & \cdots & \delta(\vec{r}_N'-\vec{r}_1)\\ \delta(\vec{r}_1'-\vec{r}_2) & \delta(\vec{r}_2'-\vec{r}_2) & \cdots & \delta(\vec{r}_N'-\vec{r}_2)\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \delta(\vec{r}_1'-\vec{r}_N) & \delta(\vec{r}_2'-\vec{r}_N) & \cdots & \delta(\vec{r}_N'-\vec{r}_N)\end{vmatrix}\tag{4.25c}$$

这里P是对N个粒子编号的一种置换，$[P]$是此置换参照规定顺序需要对换次数的奇偶性。此矩阵元对于$\vec{r}_k$或$\vec{r}_k'$置换均为反对称的。证毕。

有了这套基矢，可将粒子数表象的结果引入坐标表象。记概率幅：

$$\Psi^{(N)}_{n_1,n_2,\cdots}(\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N,t)\equiv\langle\vec{r}_1,\cdots,\vec{r}_N,t|n_1,n_2,\cdots,n_k\rangle$$

其物理意义和 ***Boson*** 的相似，只是这里n_k全都只能取 **0** 或 **1**，而$\hat{\Psi}(\vec{r},t)$相对于$\vec{r}_k$置换为反称的。

也可以得到 N 个全同 ***Fermion*** 多体 ***Schrödinger*** 方程，计算和结果形式都与 ***Boson*** 类同，并且也只含单体算符。就是说，只考虑这些粒子和外场的作用，不考虑它们之间的彼此相互作用。这正是以前量子力学方程都是线性方程的主要物理根源（结合脚注 **32**，**33**）。

证毕。

最后应当指出，**[命题C,C']的坐标表象基矢是一类只适用于非相对论的完全定域化的态矢。对于相对论性波动方程，无法构造这种完全定域化的基矢。**因为，一旦空间尺度精确到 ***Compton*** 波长的量级，

粒子位置概念便会失效（参见第 **7** 讲）。此时场量子的可定域性将受到“测量会产生与被测粒子无法区分的新的全同粒子” 这种内禀限制[31]。粒子数不再守恒，以及正反粒子对产生和湮灭的事实，让这类总粒子数固定的基矢不便于使用。

至此，全部完成了对于无相互作用情况下等价性的证明。

6，二次量子化中对易规则选择问题

与非相对论 *Schrodinger* 方程不同，所有相对论性波方程都只能以一种方式进行二次量子化。比如，***Klein-Gordon*** 场只能用对易规则量子化，***Dirac*** 场只能用反对易规则量子化，等等。假如相反，将因为违背相对论性定域因果律而得不到逻辑自洽的结果。详见第 **16** 讲 ***Pauli*** 基本定理分析。

但是，作为非相对论性的 *Schrodinger* 场，场粒子运动速度比光速 C 小很多，以致 $\beta = v/c \to 0$。于是并不存在相对论性定域因果律的提法，所以 *Schrodinger* 场用对易规则或反对易规则量子化都不会出现违背此定律的局面。

V，自作用“ *Schrödinger* 场”二次量子化——再次不古怪

1，自作用“ *Schrödinger* 场”的二次量子化

前面讨论了场量子间无相互作用的情况。在那里的 ***Lagrangian*** 密度下，***Schrödinger*** 量子场是“自由”场。现在研究场量子间有相互作用的情况。这时将发生场量子间相互影响和状态跃迁[32]。为书写

[31] 参见 ***D.***卢里，《粒子与场》，**P. 134**、**135**。

[32]其实，场量子化方法的优点恰恰表现在处理有相互作用情况，特别是处理相互作用导致不同种类粒子之间转化问题。

简单，只限于两体相互作用：

$$V(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N)=\frac{1}{2}\sum_{i\neq k}^{N}V_2(\vec{r}_i,\vec{r}_k)$$

这意味这个“经典概率幅场”有自身作用，场方程不再是线性的[33]。

此时 *Lagrangian* 密度$\mathscr{L}$为

$$\begin{aligned}\mathscr{L}=\mathscr{L}_0+\mathscr{L}'=&\left\{i\hbar\psi^*(\vec{r},t)\dot{\psi}(\vec{r},t)-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi-V_1\psi^*\psi\right\}-\\&-\frac{1}{2}\int d\vec{r}'\,\psi^*(\vec{r}',t)\psi^*(\vec{r},t)V_2(\vec{r},\vec{r}')\psi(\vec{r},t)\psi(\vec{r}',t)\end{aligned}\qquad\textbf{(4.26a)}$$

注意这里ψ^*和ψ的顺序，它使得量子化后ψ^+和ψ不对易时所得$\mathscr{L}$, $\mathscr{H}$应为厄米的。按 ***Euler-Lagrange*** 方程，这个“经典场”的运动方程为

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\psi(\vec{r},t)+V_1(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)+\left[\int d\vec{r}'\,\psi^*(\vec{r}',t)V_2(\vec{r},\vec{r}')\psi(\vec{r}',t)\right]\psi(\vec{r},t)$$

由前面叙述知道，现在的$\mathscr{L}$以及这个方程对 ***Boson*** 和 ***Fermion*** 两者都合适。

下面进行二次量子化。先转入正则框架，为此定义正则动量场

$$\pi(\vec{r},t)=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}}=i\hbar\psi^*(\vec{r},t)\qquad\textbf{(4.26b)}$$

$$\mathscr{H}=\pi\dot{\psi}-\mathscr{L}=\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+V_1\psi^*\psi+\frac{1}{2}\int dv'\,\psi^*(\vec{r}',t)\psi^*(\vec{r},t)V_2(\vec{r},\vec{r}')\psi(\vec{r},t)\psi(\vec{r}',t)$$

$$\therefore\quad\begin{aligned}H(t)=\int d\vec{r}\,\mathscr{H}=&\int d\vec{r}\left\{\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+V_1\psi^*\psi\right\}+\\&+\frac{1}{2}\int\int d\left(\vec{r}\,\vec{r}'\right)\psi^*(\vec{r}',t)\psi^*(\vec{r},t)V_2(\vec{r},\vec{r}')\psi(\vec{r},t)\psi(\vec{r}',t)\end{aligned}\qquad\textbf{(4.26c)}$$

现在进行二次量子化：$\psi(\vec{r},t)\to\hat{\Psi}(\vec{r},t)$，$\pi(\vec{r},t)\to\hat{\Pi}(\vec{r},t)$，***Boson*** 按对易规则量子化，***Fermion*** 按反对易规则$\left\{\hat{\Psi}(\vec{r},t),\hat{\Pi}(\vec{r}',t)\right\}=i\hbar\delta(\vec{r}-\vec{r}')$量

[33] 认为“量子力学乃至量子场论是线性理论，需要将其推广到非线性” 是一种误解。见下讲。

子化。比如，若取反对易规则量子化，有

$$\begin{aligned}&\left\{\hat{\Psi}(\vec{x},t),\hat{\Psi}^{+}(\vec{x}',t)\right\}=\delta(\vec{x}-\vec{x}')\\&\left\{\Psi(\vec{x},t),\Psi(\vec{x}',t)\right\}=\left\{\hat{\Psi}^{+}(\vec{x},t),\hat{\Psi}^{+}(\vec{x}',t)\right\}=0\end{aligned}\qquad\textbf{(4.27)}$$

同时，**“经典场”**的上述 ***Hamiltonian*** 成为量子场 ***Hamiltonian*** 算符：

$$\begin{aligned}\hat{H}(t)=&\int d\vec{r}\left\{\hat{\Psi}^{+}\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V_1\right)\hat{\Psi}\right\}+\\&+\frac{1}{2}\int\int d\left(\vec{r}\,\vec{r}'\right)\hat{\Psi}^{+}(\vec{r}',t)\hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t)V_2(\vec{r},\vec{r}')\hat{\Psi}(\vec{r},t)\hat{\Psi}(\vec{r}',t)\end{aligned}\qquad 34$$

记 $\hat{\Psi}(\vec{r}',t)=\hat{\Psi}'$ 和 $\hat{\Psi}^{+}(\vec{r}',t)=\hat{\Psi}'^{+}$ 等，场算符的运动方程成为：

$$\begin{aligned}\dot{\hat{\Psi}}=&\frac{1}{i\hbar}[\hat{\Psi},\hat{H}]=\frac{1}{i\hbar}\int d\vec{r}'\Big[\hat{\Psi},\ \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla'\hat{\Psi}'^{+}\cdot\nabla'\hat{\Psi}'+\hat{\Psi}'^{+}V_1\hat{\Psi}'+\\&+\frac{1}{2}\int d\vec{r}''\,\hat{\Psi}''^{+}\hat{\Psi}'^{+}V_2\hat{\Psi}'\hat{\Psi}''\Big]\\=&\frac{1}{i\hbar}\int d\vec{r}'\left\{\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla'\delta(\vec{r}-\vec{r}')\cdot\nabla'\hat{\Psi}'+\delta(\vec{r}-\vec{r}')V_1\hat{\Psi}'+\right.\\&\left.+\frac{1}{2}\int d\vec{r}''\left(\delta(\vec{r}-\vec{r}'')\hat{\Psi}'^{+}V_2\hat{\Psi}'\hat{\Psi}''-\hat{\Psi}''^{+}\delta(\vec{r}-\vec{r}')V_2\hat{\Psi}'\hat{\Psi}''\right)\right\}\quad\Rightarrow\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}i\hbar\dot{\hat{\Psi}}=&-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\hat{\Psi}+V_1\hat{\Psi}+\frac{1}{2}\int d\vec{r}'\,\hat{\Psi}'^{+}V_2\hat{\Psi}'\hat{\Psi}-\frac{1}{2}\int d\vec{r}''\,\hat{\Psi}''^{+}V_2\hat{\Psi}\Psi''\\=&-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\hat{\Psi}+V_1\hat{\Psi}+\frac{1}{2}\int d\vec{r}'\,\hat{\Psi}'^{+}V_2\hat{\Psi}'\hat{\Psi}+\frac{1}{2}\int d\vec{r}'\,\hat{\Psi}'^{+}V_2\hat{\Psi}'\Psi\end{aligned}$$

即

$$i\hbar\dot{\hat{\Psi}}=\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V_1+\int d\vec{r}'\,\hat{\Psi}'^{+}V_2\hat{\Psi}'\right)\hat{\Psi}\qquad\textbf{(4.28)}$$

这个全同 ***Fermion*** 多体系统场算符运动方程和对应的“经典

---

[34] 这里重积分前的 $1/2$ 系数是由于：N 体相互作用被重积分多算了 $N!$ 次。这只要将此积分转入粒子数表象，展开 $\hat{\Psi}(\vec{r}_i)$ 等，将 $(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots\cdots)$ 编号看成粒子编号。即知：处于 $\vec{r}$（和 $\vec{r}'$）的粒子编号可为全部可能的数值。比如编号为 $1^{\#},2^{\#},3^{\#}$ 三粒子作用：$V_3(\vec{r},\vec{r}',\vec{r}'')\to V_3(1,2,3)$ 等 6 项，故需除以 6。

Schrödinger 方程”形式相同，但波函数已经二次量子化成为场算符。另外，与这种二次量子化过程相应，任意场算符的运动方程为：

$$\frac{d\hat{\Omega}}{dt}=\frac{\partial\hat{\Omega}}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}[\hat{\Omega},\hat{H}]$$

2，转入粒子数表象[35]

i，在上述量子场的任何演化中，场量子的总数守恒。

证明：为此再次利用总粒子数算符 $\hat{N}=\int d\vec{r}\,\hat{\Psi}^{+}(\vec{r},t)\hat{\Psi}(\vec{r},t)$。按所引入的对易（反对易）规则，有

$$\begin{aligned}[\hat{N},\hat{H}]=&\int d\left(\vec{r}\,\vec{r}'\right)[\hat{\Psi}^{+}\hat{\Psi},\ \hat{\Psi}'^{+}(T'+V_1')\hat{\Psi}']+\\&+\frac{1}{2}\int d\left(\vec{r}\,\vec{r}'\vec{r}''\right)[\hat{\Psi}^{+}\hat{\Psi},\ \hat{\Psi}'^{+}\hat{\Psi}''^{+}V_2(\vec{r}',\vec{r}'')\hat{\Psi}''\hat{\Psi}']\end{aligned}$$

由于不论对 ***Boson*** 或 ***Fermion*** 均有 $[\hat{N},\hat{\Psi}^{+}]_{\pm}=\hat{\Psi}^{+}$，$[\hat{N},\hat{\Psi}]_{\pm}=-\hat{\Psi}$。于是

$$\begin{aligned}\therefore\qquad [\hat{N},\hat{H}]=&\int d\vec{r}'\left\{\hat{\Psi}'^{+}(T'+V_1')\hat{\Psi}'-\hat{\Psi}'^{+}(T'+V_1')\hat{\Psi}'\right\}\\&+\frac{1}{2}\int d\left(\vec{r}'\vec{r}''\right)\{\hat{\Psi}'^{+}\hat{\Psi}''^{+}V_2\hat{\Psi}'\hat{\Psi}''+\hat{\Psi}'^{+}\hat{\Psi}''^{+}V_2\hat{\Psi}'\hat{\Psi}''\\&-\hat{\Psi}'^{+}\hat{\Psi}''^{+}V_2\hat{\Psi}'\hat{\Psi}''-\hat{\Psi}'^{+}\hat{\Psi}''^{+}V_2\hat{\Psi}'\hat{\Psi}''\}=0\end{aligned}$$

说明场量子间的相互作用只造成场量子状态的变化，并不能真正产生或湮灭场量子，不会出现粒子种类的转化，所以场量子总数守恒。原因是现在 ***Hamiltonian*** 算符的非相对论形式：产生和湮灭算符总是配对乘积出现。于是这只引发全同粒子状态跃迁，保持粒子总数不变。

ii，由于 N 是守恒量，可以只限于研究 N 为固定值的系统。设系统的一般态矢为 $|P_N\rangle$，则按 ***Schrödinger*** 图象，此态矢按下面 ***Schrödinger*** 方程随 t 演化：

---

[35] 参见脚注 27。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|P_N\right\rangle=\hat{H}\left|P_N\right\rangle$$

注意 $\hat{H}$ 是前面量子场的 ***Hamiltonian*** 算符，也即是此全同多粒子系统的。选择一组正交归一完备的单粒子波函数族：

$$\left\{\psi_k(\vec{r})e^{-iE_k t/\hbar}\right\},\quad (T+V_1)\psi_k(\vec{r})=E_k\psi_k(\vec{r})$$

将场算子 $\hat{\Psi}(\vec{r},t)$ 及 $\hat{\Psi}^+(\vec{r},t)$ 展开为

$$\hat{\Psi}(\vec{r},t)=\sum_k a(k)\,\psi_k(\vec{r})e^{-iE_k t/\hbar},\quad \hat{\Psi}^+(\vec{r},t)=\sum_k a^+(k)\,\psi_k^*(\vec{r})e^{iE_k t/\hbar}$$

k 为完备力学量组的本征值集合。由 $\hat{\Psi},\hat{\Psi}^+$ 的对易规则，即可导出量子系数 a,a^+ 的对易规则，按 N 个全同粒子是 ***Boson***，还是 ***Fermion*** 而不同。再引入粒子数表象基矢（占有数 n_k 也按 ***Boson*** 和 ***Fermion*** 而不同）：$\left\{\left|n_1,\cdots,n_k,\cdots\right\rangle=\left|n_1\right\rangle\cdots\left|n_k\right\rangle\cdots\left|n_\infty\right\rangle\right\}$。于是

$$\left|P\right\rangle=\sum_{\{n_k\}}C_P(n_1,\cdots,n_k;t)\left|n_1,\cdots,n_k,\cdots\right\rangle,\quad \sum_k n_k=N$$ [36]

由于基矢与 t 无关，$\left|P\right\rangle$ 对时间的依赖包含在叠加系数 C 中。将上面 $\hat{\Psi},\hat{\Psi}^+,\left|P\right\rangle$ 三个展开式代入 $\left|P\right\rangle$ 的 ***Schrödinger*** 方程，注意 $\hat{H}$ 表达式、$\int dv\,\psi_k^*(\vec{r})\psi_{k'}(\vec{r})=\delta_{kk'}$、$\iint d\left(vv'\right)\psi_i^*(\vec{r})\psi_j^*(\vec{r}')V_2(\vec{r},\vec{r}')\psi_l(\vec{r}')\psi_m(\vec{r})=\left\langle i\,j\right|V_2\left|lm\right\rangle$，最后即得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|P_N\right\rangle=\hat{H}\left|P_N\right\rangle,\quad \hat{H}=\sum_i E_i\hat{a}_i^+\hat{a}_i+\frac{1}{2}\sum_{ijlm}\left\langle i\,j\right|V_2\left|l\,m\right\rangle\hat{a}_i^+\hat{a}_j^+\hat{a}_l\hat{a}_m \qquad (4.29)$$

由于这里取的 $\psi_k(\vec{r})$ 是单粒子算符（$T+V_1$）的本征函数族，故 $\hat{H}$ 的第一项是对角的。否则将为

$$H=\sum_{ij}\left\langle i\right|T+V_1\left|j\right\rangle a_i^\dagger a_j+\frac{1}{2}\sum_{ijlm}\left\langle i\,j\right|V_2\left|lm\right\rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_m \qquad (4.30)$$

3，转入坐标表象

---

[36] 这里是一般形式。当然 $\left|P\right\rangle$ 也可以是基矢中的一个，而不是叠加态。

为确定起见，设量子场为 ***Boson*** 情况，记 $\hat{\Psi}(\vec{r}_i t)=\hat{\Psi}_i$，$V^{(1)}(\vec{r}_i)=V_i^{(1)}$，$V_2(\vec{r}_i,\vec{r}')=V^{(2)}(\vec{r}_i,\vec{r}')$。于是

$$i\hbar\dot{\hat{\Psi}}_i=\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_i+V_i^{(1)}+\int d\vec{r}'\,\hat{\Psi}'^{+}V^{(2)}(\vec{r}_i,\vec{r}')\hat{\Psi}'\right)\hat{\Psi}_i \qquad \textbf{(4.31a)}$$

对此式左乘以同一时刻 t 的 $\frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|\hat{\Psi}_1\cdots\hat{\Psi}_{i-1}$，右乘以 $\hat{\Psi}_{i+1}\cdots\hat{\Psi}_N$，并记：

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|\hat{\Psi}_1\cdots\hat{\Psi}_i\cdots\hat{\Psi}_N\equiv\langle\vec{r}_1\cdots\vec{r}_i\cdots\vec{r}_N,t|$$

为区分此处 $\frac{\partial}{\partial t}$ 只对乘积态矢中第 $\vec{r}_i$ 个态矢 $\langle\vec{r}_i t|$ 的 t 求偏导，将其写为 $\frac{\partial}{\partial t_i}$。于是有

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial}{\partial t_i}\langle\vec{r}_1\cdots\vec{r}_i\cdots\vec{r}_N,t|&=\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_i+V_i^{(1)}\right)\langle\vec{r}_1\cdots\vec{r}_i\cdots\vec{r}_N,t|\\&+\frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|\int d\vec{r}'\,\hat{\Psi}_1\cdots\hat{\Psi}_{i-1}\hat{\Psi}'^{+}\hat{\Psi}'\,\hat{\Psi}_i\hat{\Psi}_{i+1}\cdots\hat{\Psi}_N V^{(2)}(\vec{r}_i,\vec{r}')\end{aligned} \qquad \textbf{(4.31b)}$$

将等式右边第二项中 $\hat{\Psi}'^{+}(\vec{r}'t)$ 向左逐一对易挪动（以下 $\hat{\Psi}$ 中略写 t），即

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\sqrt{N!}}\int d\vec{r}'\langle 0|\hat{\Psi}_1\cdots\hat{\Psi}_{i-2}\left(\delta(\vec{r}_{i-1}-\vec{r}')+\hat{\Psi}'^{+}\hat{\Psi}_{i-1}\right)\hat{\Psi}'\hat{\Psi}_i\cdots\hat{\Psi}_N V^{(2)}(\vec{r}_i,\vec{r}')\\&=\langle\vec{r}_1\cdots\vec{r}_i\cdots\vec{r}_N,t|V^{(2)}(\vec{r}_i,\vec{r}_{i-1})+\\&\quad+\frac{1}{\sqrt{N!}}\int d\vec{r}'\langle 0|\hat{\Psi}_1\cdots\hat{\Psi}_{i-3}\left(\delta(\vec{r}_{i-2}-\vec{r}')+\hat{\Psi}'^{+}\hat{\Psi}_{i-2}\right)\hat{\Psi}_{i-1}\hat{\Psi}'\hat{\Psi}_i\cdots\hat{\Psi}_N V^{(2)}(\vec{r}_i,\vec{r}')\\&=\cdots=\langle\vec{r}_1\cdots\vec{r}_i\cdots\vec{r}_N,t|V^{(2)}(\vec{r}_i,\vec{r}_{i-1})+\langle\vec{r}_1\cdots\vec{r}_i\cdots\vec{r}_N,t|V^{(2)}(\vec{r}_i,\vec{r}_{i-2})+\cdots\\&\quad+\frac{1}{\sqrt{N!}}\int d\vec{r}'\langle 0|\left(\delta(\vec{r}_1-\vec{r}')+\hat{\Psi}'^{+}\hat{\Psi}_1\right)\hat{\Psi}_2\cdots\hat{\Psi}_{i-1}\hat{\Psi}'\hat{\Psi}_i\cdots\hat{\Psi}_N V^{(2)}(\vec{r}_i,\vec{r}')\\&=\sum_{j(<i)}\langle\vec{r}_1\cdots\vec{r}_i\cdots\vec{r}_N,t|V^{(2)}(\vec{r}_i,\vec{r}_j)\end{aligned}$$

代入上式，对脚标 i 求和，将时间导数各项合并，略去脚标 i，得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\vec{r}_1\cdots\vec{r}_i\cdots\vec{r}_N,t| = \sum_i\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_i + V_i^{(1)}\right)\langle\vec{r}_1\cdots\vec{r}_i\cdots\vec{r}_N,t| + \sum_{i,j,(i>j)} V^{(2)}(\vec{r}_i,\vec{r}_j)\langle\vec{r}_1\cdots\vec{r}_i\cdots\vec{r}_N,t| \tag{4.31c}$$

用态矢$|N,k\rangle$右乘此左矢方程，并记归一化概率幅：

$$\Phi_k^{(N)}(\vec{r}_1,\cdots\vec{r}_N,t) = \langle\vec{r}_1\cdots\vec{r}_i\cdots\vec{r}_N,t|N,k\rangle \tag{4.31d}$$

这里$k=(\bar{k}E\alpha)$记完全力学量组本征值集合任一组值，标志全同粒子系统状态，α为其余量子数。最后即得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi_k^{(N)}(\vec{r}_1,\cdots\vec{r}_N,t) = \sum_i\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_i + V_i^{(1)}(\vec{r}_i)\right]\Phi_k^{(N)}(\vec{r}_1,\cdots\vec{r}_N,t) + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}V^{(2)}(\vec{r}_i,\vec{r}_j)\Phi_k^{(N)}(\vec{r}_1,\cdots\vec{r}_N,t) \tag{4.32}$$

按本节开始设定，这里$\Phi^{(N)}$具有 ***Boson*** 波函数的对称性。

VI，二次量子化方法评论——有理性基础的推广

总结 ***Schrodinger*** 方程“二次量子化”的“程式”：**将单粒子 *Schrodinger* 方程看作“经典”的“*Schrodinger* 场”的场方程，保持场方程形式不变，只将方程中场量的普通时空函数替换为满足一定的等时对易规则的场算符，就得到对应这个“经典场”的非相对论量子场的场方程，构建起“非相对论量子场论”。**上面已经严格证明，**这个量子场论就是全同多体非相对论量子力学，场方程就是该单粒子的全同多体 *Schrodinger* 方程。**由于从牛顿力学观点看，***Schrodinger*** 方程已经是一次量子化，所以这次量子化称作“二次量子化”，**这个“程式”称作“二次量子化方法”。**于是，**非相对论量子力学范畴内，二次量子化并不是一个假设，而只是导出全同多体 *Schrodinger* 方程的一种可以证明的简化约定。它也没有使非相对论量子力学增加实质性内容。**

即便考虑全同粒子间存在相互作用，非相对论量子场论 *Hamiltonian* 中每项所含静质量 $m \neq 0$ 粒子的产生湮灭算符个数都相等，这个场论仍然保持着初始粒子总数守恒。因此，全部能够发生的过程只涉及粒子状态之间的跃迁，不会出现粒子真的产生湮灭或转化。这正是非相对论量子力学的普遍特征。此时力学量算符的作用只是系统状态空间的自身映射。这正说明，非相对论量子场论实际上并不是场论，而仍然是个“力学”理论。其中所用场量子概念也并非实质性新概念，而只是描述状态跃迁的数学语言（虽然粒子数表象本身并不管粒子数守恒与否！）。然而，考虑到多体 **Schrodinger** 方程比单体方程复杂得多，所以即便仅仅扩充了全同多体量子力学的数学描述，容许用单粒子波函数构造多粒子波函数，用单体 **Schrodinger** 方程形式阐述全同多体量子力学问题，也算得是一个很大的理论优点。

但是，将这种做法推广到 *Schrödinger* 方程以外，用到相对论情况，不管原来场是经典的 *Maxwell* 场，还是已经量子化的 *Dirac*“场”、*K-G*“场”，都进行如此的“二次量子化”，则是一个其正确性只能由实验检验的实质性推广[37]，同时也是一个理性的推广。

其中，对 *Maxwell* 场这样做实际上应当是（从经典场到量子场的）第一次量子化（也就是量子化）。但从量子化手续的特征看，那却是标准的“二次量子化”方法。人们有时侧重于方法论，将 ***Maxwell*** 场量

---

[37] ***Maxwell*** 场二次量子化是由 ***Dirac***（1927）发展的。随后，***Wigner*** 和 ***Jordan*** 把它推广到费米子情况（1928）。二次量子化的一般论述参见 ***J.M.Ziman, Elemants of Advanced Quantum Theory, (Reprinted*** **1980)**；***Gordon Baym, Lectures on Q-M,*****P.411-439(*****with problems*****)**；***G.L.Trigg, Quantum Mechanics, Chapter*** **14,** ***Nonrelativistic field(scalar)***、***Dirac field,electromaguetic field or Quantization***；***G . Rickayzen, Green's Functions and Condensed Matter, Appendix A. , "Summary of the Results of Second Quantization."***，**P.341, 1980**。

子化称作二次量子化[38]。

应当说，**假如二次量子化方法只用于非相对论 *Schrodinger* 方程，尚未展现这个方法最本质特征和最大优点：实际上，方法允许由于粒子相互作用出现粒子种类转化，导致粒子数不守恒。因此，这种推广将量子理论从粒子数守恒的力学理论提升到可以考虑粒子转化的更高更广的新领域。**比如，永远是相对论性的 ***Maxwell*** 场，即便与非相对论物质粒子相互作用，也会有净产生（湮灭），使初始光子数可能不守恒。

其实，并不存在什么限制使二次量子化方法只能局限于低能情况的 ***Schrodinger*** 方程。**物理上，只要那个场的描述对象具有波-粒二象性和全同性，就可以用这个方法建立起它们全同多粒子的量子动力学理论。而这些性质正是这几个方程描述的微观粒子共同具有的性质。它们也是这几个方程能够被成功推广的物理基础！**也可以换个角度说，对于介质温度的标量场、流体速度的矢量场、弹性介质的应力应变张量场，等等，形式上未尝不可以对它们实施（对易或反对易的）“二次量子化”手续，但物理上不可能成功。原因正是这些场描述的对象并不具有微观粒子的波-粒二象性和全同性。

总之，二次量子化方法是建立微观世界全同多粒子系统量子动力学理论的简洁而正确的途径。值得再次强调的是，由于这时方程的相对论性质，导致相应场量子的数目可以不守恒，出现（*Lagrangian* 密度中所包含的）粒子在守恒律容许下的产生、湮灭和转化。

---

[38] 有的人将这个“二次”解释成由于“从几何光学到 ***Maxwell*** 电磁波理论是一次量子化”，这并不合适。**2000** 年以前还没有量子理论，***Maxwell*** 电磁波理论是经典的。

相互作用量子场的全部性质，包括 ***Fermion*** 还是 ***Boson***、对易还是反对易规则、相对论性还是非相对论性、初始场量子数必定守恒还是可以不守恒、粒子间如何转化，等等，全都取决于事先选定的 ***Lagrangian*** 密度。特别是，***Pauli*** 定理还表明，如果不按照自旋整数（半整数）选择对易（反对易）规则，将会招致结果违反相对论性定域因果律。