

量子统计基础的一些考量 ——合抱之木，生于毫末¹

I, 前 言

II, 近独立全同粒子平衡态系综统计理论的基本公设

- 1, 第一公设——“等概率各态出现”公设
- 2, 第二公设——“不同能级无规相差”公设

III, 两个公设的初步分析

- 1, 公设推论之一：统计与能量的关系—— $B-E$ 分布、 $F-D$ 分布、 $M-B$ 分布
- 2, 公设推论之二：部分求迹、路径积分、等效 *Lagrangian* \mathcal{L}_{eff}
- 3, 第二公设成立与失效分析

IV, 第三公设——*Pauli* 基本定理证明及分析

- 1, 统计与自旋关系的 *Pauli* 基本定理和证明
- 2, 证明充分性分析

※ ※ ※

I, 前 言

众所周知，植根于微观粒子波粒二象性、全同粒子不可区分性以及量子平均基础上的量子统计，和植根于可区分质点概率平均基础上的经典统计有重大差异。更何况，考虑到量子纠缠的空间非定域关联，

¹ 老子，《道德经》，64 章。

有时更会显得特别。尽管从统计学的基本公设——概率均等基本思路看，两者其实是贯通的。

像物理学其它分支一样，量子统计也有作为前提的公设，共计有三条：**1, 体系处于所有可能实现的本征态上的概率均等**，**2, 不同能级相差是无规的**，**3, 自旋（整数、半整数）与统计（性质）关联**。最终，它们逻辑地决定着以下重要统计特性：**统计与能量关联**，**统计与自旋关联**，**统计权重分配原则**，**统计与量子纠缠关联**，等等。

下面逐条分析量子统计的这些基本假设。

II, 近独立全同粒子平衡态系综统计理论的基本假设

1, 第一假设——“各态等概率出现”假设

无论经典统计或量子统计，它们所依据的基本假设都相同²：**排除掉可能存在的对体系某些状态的限制后，所有没有理由被排除的状态都会在系综中出现，并以等权统计**。简单说就是：**体系处在所有可能本征态上的概率均等**。这条假设不但很基本、很重要，其实也很简单、很自然。细分起来，它包含两点内容：“各态出现”³和“概率均等”。照此思想推论，同一能级的所有简并态，除非有其它量子数限制，否则必须受到等权对待。

其实，所说本征态不必是能量本征态，任何能够撑起表象的态矢集合都可以（但能量表象因为有第二公设而更方便）。而且，即便存在对状态的某种制约 Ω ，（向全体满足制约的态投影的）全体投影算

² H.H.博戈留波夫，《量子统计学》，科学出版社，1959年，p.10；P.A.M.Dirac.，《量子力学原理》，科学出版社，1965年，P.136。

³ 注意，这里“各态出现假设”不是以前演化中的“各态历经假设”！后者是指，只要时间足够长，系统演化将会经历（或接近）任何设定的态。对孤立系已证明这是不正确的。

符的等权叠加就可以视作此时的单位算符。以单粒子为例：

$$I = \int_{\vec{r} \in \Omega_r} |\vec{r}\rangle d\vec{r} \langle \vec{r}|; \quad I = \int_{\vec{p} \in \Omega_p} |\vec{p}\rangle d\vec{p} \langle \vec{p}|; \quad I = \sum_{(nlm) \in \Omega} |nlm\rangle \langle nlm|; \quad I = \dots \quad (16.1)$$

就是说，如果发现有什么限制因素，那就计入这个因素，进行修正后，继续按照这条公设考虑。比如掷骰子，如果没有发现异常，就假设 6 个面都会出现，并且出现概率都是 1/6。如果发现这颗骰子被人做了手脚，不均匀，那就作适当修改⁴以排除不均匀性影响，再继续按公设对待这颗骰子（假如不能简便地用好骰子来替换的话）。

2, 第二公设——“不同能级无规相差”公设

上面等概率各态出现公设经常被说成是平衡态统计力学的唯一基本公设⁵。实际上，量子统计中它并不是唯一基本公设，还经常用到另一条有时不明确表示的基本公设：“不同能级定态之间不存在干涉”，又说成：“不同能级状态之间位相差是随机的”。结果是测量平均之后，统计计算之时，不同能级之间非相干叠加，不存在显示相干性的交叉项。关于这条公设成立与失效的分析见下节第 3 点。

III, 两个公设的初步分析

1, 公设推论之一：统计与能量的关系——B-E 分布、F-D 分布、M-B 分布。

根据两个基本公设，针对全同 *Boson*、全同 *Fermion*、经典粒子三种情况，可以导出粒子数按能量分布规律。设体系 *Hamiltonian* 为

$$H = \sum_k \frac{\vec{p}_k^2}{2m} + \sum_{k>l} u_{kl}(\vec{r}_{kl}) \quad ; \quad H\psi_i = \varepsilon_i\psi_i \quad (16.2)$$

⁴ 依据“实验加逻辑推理”的科学精神进行修改。参见[附录 B]《科学，物理学，量子力学》。

⁵ 例如见，李政道《统计力学》，上海科学技术出版社，2007 年。P.2。

设想有 $N (>> 1)$ 个这样体系（下面称此体系为“粒子”），构成一个系综。设这些粒子彼此近似独立⁶（注意，独立只能是近似的。必须存在哪怕是微小的能量交换，只要时间足够长，整个系综总能达到平衡状态。否则只是由初始状态决定的一团“散沙”），处于温度平衡状态。这种处于热平衡近独立粒子集合称为正则系综。于是，系综总 *Hamiltonian* 为粒子 H 之和，总本征态则是各个粒子本征态 ψ_i 之积，

$$\mathcal{H} \equiv \sum H \quad ; \quad \Psi = \prod \psi \quad (16.3a)$$

假设系综总能量为 \mathcal{E} ，总粒子数为 N ，每个粒子的能级和简并度分别为 $\{\varepsilon_i, d_i\}$ ，每个能级 ε_i 上占有的粒子数为 n_i 。于是有

$$\mathcal{E} \equiv \sum_{i=1} n_i \varepsilon_i \quad ; \quad N = \sum_{i=1} n_i \quad (16.3b)$$

现在问：这 N 粒子按能级 ε_i 占有数分布 $\{n_i\}$ 如何？从两条基本公设出发，再考虑系综中粒子全同性性质，可以分别导出三种分布⁷：

[全同 *Boson* 的 *B-E* 分布]

$$\langle n_i \rangle = \frac{d_i}{\exp[(\varepsilon_i - \mu)/k_B T] - 1} \quad (16.4a)$$

常数 μ 称作粒子化学势（或称 *Gibbs* 热力学势），与占有数总和等于 N 的条件等式有关。 μ 应当低于所有能级 ε_i ，否则相应的占有数成为负值。显然，最低能级 ε_0 占有数 n_0 最大，呈现超低温下粒子凝聚现象。

[全同 *Fermion* 的 *F-D* 分布]

$$\langle n_i \rangle = \frac{d_i}{\exp[(\varepsilon_i - \mu)/k_B T] + 1} \quad (16.4b)$$

⁶ 强关联情况见下面第 V 部分。

⁷ 推导参见例如张永德《量子力学（第 II 版）》，北京：科学出版社，2010 年。P.381。对三种分布应用的详细讨论可见李政道《统计力学》，上海科技出版社，2006 年。第 1 章。

当 $T \rightarrow 0$ 时, $\varepsilon_i > \mu$, $n_i = 0$; $\varepsilon_i < \mu$, $n_i = d_i$, 表明超低温下粒子遵守 *Pauli 不相容原理* 的由基态起始的按态填充。

[经典粒子的 *M-B* 分布]

$$\langle n_i \rangle = d_i \exp[-(\varepsilon_i - \mu)/k_B T] \quad (16.4c)$$

这就是 *Boltzmann* 分布, 它处于经典统计力学基本原理的位置。

2, 公设推论之二: 部分求迹、路径积分、有效 *Lagrangian* \mathcal{L}_{eff}

对所有可能态等权处理思想经常被应用在各种场合。首先是部分求迹等权叠加。设有 A, B 两个子体系, 如果要统计地排除其中 B 的影响, 通常是对 B 的全体可能状态进行部分求迹, $tr^{(B)} \rho_{AB} = \rho_A$ 。做法正是基于对 B 体系的相应假设。其次是路径积分。思想是对全体可能路径 (各自提供一个作用量的相因子) 作等权叠加处理。最后是等效 *Lagrangian* \mathcal{L}_{eff} 方法, 也是对不打算考虑的部分作了路径等权平均。

3, 第二公设成立与失效分析

设有大量粒子 a 组成一个带有先验概率分布的混态量子系综 $\mathcal{E}_A = \{|\psi_i\rangle_a, p_i\}$, 它又常用密度矩阵 $\rho_A = \sum_{i=1}^n p_i |\psi_i\rangle_a \langle \psi_i|$ 表示⁸。这和全体粒子都处于相应纯态 $|\Psi\rangle_A = \sum_{i=1}^n \sqrt{p_i} |\psi_i\rangle_a$ 不同。算符 Ω_a 期望值分别为

$$\left\{ \begin{array}{l} tr(\Omega_a \rho_A) = \sum_{i=1}^n p_i \langle \psi_i | \Omega_a | \psi_i \rangle_a \\ \langle \Psi | \Omega_a | \Psi \rangle_A = \sum_{i=1}^n p_i \langle \psi_i | \Omega_a | \psi_i \rangle_a + \sum_{i,j,i \neq j} \sqrt{p_i p_j} \langle \psi_i | \Omega_a | \psi_j \rangle_a \end{array} \right. \quad (16.5a)$$

上式第一行是当 A 处于量子系综时, 按混态密度矩阵 ρ_A 统计平均计

⁸ \mathcal{E}_A, ρ_A 两者含义有差别, 见张永德《高等量子力学》, 北京: 科学出版社 2010 年。第 1 章。

算。它包含两个层次的平均操作：对所有纯态进行量子力学平均 $\langle \psi_i | \Omega_a | \psi_i \rangle_a$ ，得到一系列期望值；再对全部期望值按设定的权重分布 $\{p_i\}$ 进行经典平均。相应的计算结果被解释成对量子系综进行大量重复测量平均值的预言。上式第二行是当 A 处于纯态 $|\psi\rangle_A$ 。这时只有量子平均。两种表达式差别在于有无非对角元交叉项：纯态有，混态没有。

换个角度讨论。如果系综与外界有相互作用，通过把有关的外界包括进来组成大系统的办法，总可以将大系统看作孤立系，处于纯态。总波函数将依赖于系综变量 x 和外界变量 q 。对系综的 Ω 作测量，有

$$\begin{aligned} \Phi(x, q, t)_{total} &= \sum_n C_n(q, t) \varphi_n(x, t) \\ \Rightarrow \overline{(\Phi, \Omega \Phi)}_{x, t} &= \sum_{n, m} C_n^*(qt) C_m(qt) \int dx \varphi_n^*(xt) \Omega \varphi_m(xt) \quad (\text{量子平均}) ; \\ \Rightarrow \langle \Omega \rangle &= \overline{\overline{(\Phi, \Omega \Phi)}_{x, t, q, t}} = \sum_m \overline{C_m^*(q, t) C_m(q, t)} \cdot \overline{\langle \Omega \rangle_{mm}} \quad (\text{经典平均}) \end{aligned} \quad (16.5b)$$

这里的量子平均一般而言应是含时平均。利用第二条基本公设⁹：不同能级无规相差公设，排除不同能级概率幅之间的干涉。于是有

$$\int dx \varphi_n^*(xt) \Omega \varphi_m(xt) = \overline{\langle \Omega \rangle_{nm}} \delta_{nm} \Rightarrow \langle \Omega \rangle = \sum_n |C_n|^2 \overline{\langle \Omega \rangle_n} \quad (\sum_n |C_n|^2 = 1) \quad (16.6)$$

现在对“无规相差”公设检讨如下：注意每个定态后面还有一个时间相因子 $e^{-iEt/\hbar}$ ，因此不同能级间有一个时间相关的位相差： $e^{-i(E_m - E_n)t/\hbar}$ 。只要记住 $\hbar = 6.582 \times 10^{-16} \text{ev} \cdot \text{sec}$ 很小，就能理解，对于通常

⁹ 这里展开已取能量表象，基矢不一定是 Ω 的本征态。

的能级间距（即便小到 $\sim 0.001\text{eV}$ ）乘以测量持续时间 τ （即便短到 $\tau \approx 1\text{ns} = 10^{-9}\text{sec}$ ）来说， \hbar 也足够小，使得 $(\tau \Delta E / \hbar) \gg 2\pi$ 。就是说，由于测量持续很多个振荡周期，这个相因子的快速正负交变振荡将所测结果抹平成为零。用数学思想来简明表示就是

$$e^{i\beta(x-y)} \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \delta_{x,y} \quad (16.7)$$

于是不同能级概率幅交叠时是非相干的，这就是此公设的由来。但是，值得注意的是，如果测量持续时间 τ 很小，两个能级的间距又很小，以致于 $(\tau \Delta E / \hbar) \leq 2\pi$ ，那就要放弃这个不同能级无规相差假设。鉴于目前时间精密测量已经能够达到 10^{-16}s ，能级间距又经常涉及 $\leq 0.001\text{eV}$ ，实验和理论计算早就应当考虑此公设失效的效应了。

IV, 第三公设——Pauli 基本定理证明及分析

1, 统计与自旋关系的 Pauli 基本定理和证明

[Pauli 基本定理] “描述整数自旋粒子的场量遵守对易规则，组成的全同粒子体系总波函数对于粒子间置换是对称的，体系应根据 Bose—Einstein 统计量子化，称作 *Boson*；半整数自旋粒子的场量遵守反对易规则，组成的全同粒子体系总波函数对于粒子间置换是反对称的，体系应根据 *Fermi—Dirac* 统计量子化，称作 *Fermion*。”

几乎所有相对论量子场论书都叙述此定理，但大多不列证明或语焉不详，个别书虽然给出了证明，却很繁复。文献的简要情况列举在脚注中¹⁰。下面简洁证明定理成立的充分条件。证明参照阿希叶泽

¹⁰ 定理最初由 Pauli 提出: *W. Pauli, Phys. Rev., 58(1940)716*; 一个现代处理见 *R.F. Streater and A.S. Wightman, 《PCT, Spin and Statistics, and All That》, § 4-4, Benjamin, New York, 1964*; *S. Weinberg, 《The Quantum Theory of Fields》 Vol. I, Cambridge University Press, 1995. P. 233-238*。证明完整但较繁杂; A. H. 阿希叶泽尔等, 《量子电动力学第》证明不算繁杂, 但

尔叙述，但补充了该书欠缺的 *Fermion* 反对易子量子化证明，并避免了利用“电子海”概念¹¹。

证明之前，预先简单提一下 *Lorentz* 群的群表示。众所周知，*Lorentz* 群的每个不可约表示可以用两个数表示 (j,k) ，依照 $2j$ 和 $2k$ 是否有相同的奇偶性来决定表示的性质¹²：

第一，如果 $2j$ 和 $2k$ 的奇偶性相同，表示是单值的，转动 2π 后不出负号，称作张量表示。按张量表示变换的量称作张量。其中又区分为： (j,k) 中两个数都是整数称作 $+1$ 类表示，偶秩张量属于 $+1$ 类； (j,k) 均为半整数称作 -1 类，奇秩张量属于 -1 类表示，矢量就属于这一类。

第二，如果 $2j$ 和 $2k$ 的奇偶性不同，表示是双值的，空间转动 2π 时出一个负号，称作旋量表示。按旋量表示变换的量称作旋量。其中又区分为：（整数 j ，半整数 k ）称作 $+\varepsilon$ 类表示；（半整数 j ，整数 k ）称作 $-\varepsilon$ 类表示。*Dirac* 双旋量便按照 $(1/2,0)$ 和 $(0,1/2)$ 变换。

属于不同表示类的量相乘时，乘积量归属于那类，有个乘法表。规则等同于通常乘法表（例如 $(-1)(-1)=+1$, $(-1)\cdot\varepsilon=-\varepsilon$, $-\varepsilon\cdot\varepsilon=-1$, 等等），只需注意有一个例外 $\varepsilon\cdot\varepsilon=(-\varepsilon)\cdot(-\varepsilon)=+1$ 。另外，如果某个量 ψ 按表示 (j,k) 变换并且属于 $+1$ （或 -1 ），则它的复数共轭的量 ψ^* 也按表示 (j,k) 变换，并属于同一类；但如果 ψ 属于 $+\varepsilon$ 类（ $-\varepsilon$ 类）那么 ψ^* 就属于 $-\varepsilon$ 类（ $+\varepsilon$ 类）。

对 *Fermion* 情况的证明其实并未进行。详细参见下面叙述。

¹¹ A. H. 阿希叶泽尔等编著，黄念宁、于敏译，《量子电动力学》，科学出版社，1964年。P.166-170, 181-187。

¹² 例如，按 $(0,0)$ 变换为标量；按 $(1/2,1/2)$ 变换为矢量； $(1,1)$ 零迹二秩对称张量； $(1,0)$ 和 $(0,1)$ 二秩反称张量； $(1/2,0)$ 和 $(0,1/2)$ 为 *Dirac* 双旋量，等等。

证明：相对论性定域因果律主张，由于粒子运动和作用传播的速度不会大于光速。因此，如果波动场内任意两点 (\vec{r}, t) 和 (\vec{r}', t') 彼此以类空间隔相隔 $l^2 = (\vec{r} - \vec{r}')^2 - c^2(t - t')^2 > 0$ ，局域化定义在两点上的任何物理量或物理操作，肯定不存在相互影响。其结果表述为：**定域在类空间隔两点上的任何两个物理量算符 $\hat{A}(x), \hat{B}(x')$ 应当相互对易。**比如，对 *Hamiltonian* 密度 $\mathcal{H}(x)$ ，有

$$[\mathcal{H}(x), \mathcal{H}(x')] = 0, \quad (x - x')^2 > 0 \quad (16.8)$$

这就是**相对论性定域因果律**，又称作**微观因果性原理**。

对 *Boson* 情况，场量本身（即一次量）就可以有物理意义。采用等时对易子为零（注意是类空间隔）进行量子化是满足相对论性定域因果律的；但对 *Fermion* 情况，旋量波函数或旋量场场量 $\psi(x)$ 本身没有直接的物理意义。因为它们在转动 2π 时出负号，本身宇称是不确定的。有物理意义的只是那些对于 $\psi(x)$ 是二次幂的量。如果它们是空间定域化的，原理就要求它们在类空间隔分开两点上的量必须对易。由于有分解公式

$$[A, BC] = [A, B]_{\pm} C \mp B [A, C]_{\pm}$$

于是用二次幂构成的物理量既可以转化为场量对易子运算，也可以转化为场量反对易子运算。所以，**采用等时对易子或等时反对易子为零进行量子化，都能保证满足上述相对论性定域因果律。**

现在，假设场量 $\psi_r(x_1)$ 和 $\psi_s(x_2)$ 的对易子或反对易子是某个 c 数函数，它在类空间隔下为零。由于时空均匀性，这个 c 数函数只能依赖于时空坐标的差值，即

$$[\psi_r(x_1), \psi_s^+(x_2)]_{\pm} = F_{rs}(x_1 - x_2) \quad (16.9)$$

作为量子“游戏”的基本规则，此等式应当是 Lorentz 变换不变的，右边只能是张量(或含常数矩阵的张量和)形式。定理要求证明：对整数自旋，等式左边只能用对易子；对半整数自旋则只能用反对易子。

为确定起见，假设每个算符 ψ_r 只属于上面 4 类(+1, -1, + ε , - ε) 中某一类。于是，整数自旋的量属于 +1 和 -1 类的量，而复数共轭使 +1 和 -1 类的量仍然留在原来类中。但半整数自旋的量将属于 + ε 类和 - ε 类的量，复数共轭将把 + ε 类和 - ε 类的量互换。因此可知：对整数自旋， ψ_r, ψ_r^+ 属于 +1 类量；对半整数自旋， ψ_r, ψ_r^+ 属于 -1 类量。由此得到结论：作为一般对易子计算结果的右边张量 $F_{rs}(x)$ ，在整数自旋下是偶秩的，在半整数自旋下是奇秩的。这与场怎样量子化无关，即与函数 $F_{rs}(x)$ 等式左侧是对易子还是反对易子无关。

下面尽量确定这些奇偶张量的一般性质。为论述简明，设定整数和半整数自旋粒子的质量 m 相同。比如对 $K-G$ 场和其开根 Dirac 场为

$$E^2 = \vec{P}^2 c^2 + m^2 c^4 \rightarrow \begin{cases} (\square - \lambda_c^{-2})\phi = 0 \\ (\gamma \cdot \partial - \lambda_c^{-1})\psi = 0 \end{cases}$$

λ_c 是粒子 Compton 波长。于是，现在问题只涉及一个不变标量函数 $\Delta(x)$ 及其导数：

$$\Delta(x) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\sin \omega_k t}{\omega_k} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}, \quad \hbar \omega_k = \sqrt{\hbar^2 \vec{k}^2 + m^2 c^4} \quad (16.10)$$

显然，标量函数 $\Delta(x)$ 有三个特点：i, Lorentz 变换不变的；ii, 空间坐标的偶函数；iii, 时间变数的奇函数。因此，当 $t=0$ ，或一般说，对所有类空间隔它为零。因此，对 $\Delta(x)$ 坐标一次微分便得到矢量，

二次微分便得到二秩张量，等等。因此，无论是对易子或反对易子，所产生张量的一般形式应当为：

$$F_{rs}(x) = f_{rs}^{(n)}(\partial_\mu^{(x)})\Delta(x) \quad (16.11)$$

这里 c 数函数 $f_{rs}^{(n)}(\partial_\mu^{(x)})$ 是算符 ∂_μ 的常系数多项式，最高幂次为 n ，即为张量 $F_{rs}(x)$ 的秩。注意， $f^{(n)}(\partial_\mu^{(x)})$ 系数中可能含有非对易常数矩阵（诸如 γ_μ 等）。根据上面奇偶性分析，可以将对角项 $r = s$ 分别写为：

$$[\psi_r(x_1), \psi_r^\dagger(x_2)]_\pm = \begin{cases} F_{rr}^{(2n)}(\partial_\mu^{(1)})\Delta(x_1 - x_2), & \text{for } 2(j+k) = 2N \\ F_{rr}^{(2n+1)}(\partial_\mu^{(1)})\Delta(x_1 - x_2), & \text{for } 2(j+k) = 2N + 1 \end{cases} \quad (16.12)$$

上面一行张量等式针对整数自旋情况， $F_{rr}^{(2n)}(\partial_\mu^{(1)})$ 只含偶数阶导数项；

下行张量等式针对半整数自旋情况， $F_{rr}^{(2n+1)}(\partial_\mu^{(1)})$ 只含奇数阶导数项。

首先，对整数自旋的 *Boson* 情况，构造如下函数：

$$K(x_1 - x_2) = [\psi_r(x_1), \psi_r^\dagger(x_2)]_\pm + [\psi_r(x_2), \psi_r^\dagger(x_1)]_\pm \quad (16.13)$$

显然，不论由对易子或反对易子组成， $K(x_1 - x_2)$ 对时空坐标 x_1, x_2 的替换 $1 \leftrightarrow 2$ 是对称的。所以 $K(x_1 - x_2)$ 应当只包含对 $\Delta(x_1 - x_2)$ 的偶数次空间导数和奇数次时间导数。即时空求导次数总加起来是奇数。利用 (12) 式中对整数自旋的张量等式，可知左边无论取对易子或反对易子都不可能，除非 $F_{rr}^{(2n)}(\partial_\mu^{(1)})$ 为零。于是，对整数自旋情况得到：

$$[\psi_r(x_1), \psi_r^\dagger(x_2)]_\pm + [\psi_r(x_2), \psi_r^\dagger(x_1)]_\pm = 0, \quad 2(j+k) = 2N$$

再进一步，左方取反对易子是不可能的，因为那实际上当 $x_1 = x_2$ 时是正的。因此左方只能取对易子。注意此式左边两项对空间坐标差都是偶的，只对时间差是奇的。然而前面说过，由于对易子的 *Lorentz* 变

换不变性，等时对易子为零即类空间隔下为零，于是类空间隔下两项分别为零。到此就证明了对 *Boson* 情况有结论：

$$[\psi_r(x_1), \psi_s^+(x_2)]_- = F_{rs}^{(2n)} (\partial_\mu^{(1)}) \Delta(x_1 - x_2), \quad 2(j+k) = 2N \quad (16.14)$$

其次，对半整数自旋的 *Fermion* 情况，构造函数 $L(x_1 - x_2)$ ：

$$L(x_1 - x_2) = [\psi_r(x_1), \psi_r(x_2)]_+ + [\psi_r(x_2), \psi_r(x_1)]_+ = 2[\psi_r(x_1), \psi_r(x_2)]_+ \quad (16.15)$$

函数对 $1 \leftrightarrow 2$ 替换为对称。可以证明，至少在等时情况下它为零：若 $\vec{r}_1 \neq \vec{r}_2$ ，取 \vec{r}_2 作转轴，令 \vec{r}_1 绕 \vec{r}_2 一周， x_1 回到原位。但旋量场 $\psi_r(x_1)$ 转 2π 后出一个负号，于是 $[\psi_r(x_1), \psi_r(x_2)]_+ = -[\psi_r(x_1), \psi_r(x_2)]_+$ 。这导致

$$[\psi_r(x_1), \psi_r(x_2)]_+ = 0, \quad 2(j+k) = 2N + 1 \quad (16.16)$$

这时对易子不会同时也为零。因为那样将直接导致场量为零。按 *Lorentz* 不变性，可以推广至类空间隔 $(x - x')^2 > 0$ 下反对易子为零。

同理(或直接对上式取厄密共轭)可得，类空间隔下还有：

$$[\psi_r^+(x_1), \psi_r^+(x_2)]_+ = 0, \quad 2(j+k) = 2N + 1 \quad (16.17)$$

最后，再构造如下 $1 \leftrightarrow 2$ 替换仍为对称的函数：

$$M(x_1 - x_2) = [\psi_r(x_1), \psi_r^+(x_2)\psi_r(x_2)]_- + [\psi_r(x_2), \psi_r^+(x_1)\psi_r(x_1)]_- \quad (16.18a)$$

与前相同，令 \vec{r}_1 绕 \vec{r}_2 一周，旋量场 $\psi_r(x_1)$ 和 $\psi_r^+(x_1)$ 均出负号，于是有

$$M(x_1 - x_2) = -[\psi_r(x_1), \psi_r^+(x_2)\psi_r(x_2)]_- + [\psi_r(x_2), \psi_r^+(x_1)\psi_r(x_1)]_- \quad (16.18b)$$

由两式相减，即得：

$$\begin{aligned} 0 &= [\psi_r(x_1), \psi_r^+(x_2)\psi_r(x_2)]_- \\ &= [\psi_r(x_1), \psi_r^+(x_2)]_+ \psi_r(x_2) - \psi_r^+(x_2) [\psi_r(x_1), \psi_r(x_2)]_+ \end{aligned}$$

按上面已证结果，第二项反对易子为零，所以第一项应为零。但

$\psi_r(x_2) \neq 0$ ，最后就得到（注意在类空间隔 $t^2 > 0$ 下，即等时且 $\vec{r}_1 \neq \vec{r}_2$ ）：

$$[\psi_r(x_1), \psi_r^\dagger(x_2)]_+ \Big|_{t_1=t_2} = 0, \quad \vec{r}_1 \neq \vec{r}_2$$

返回半整数自旋张量等式，可知应该取其中反对易子进行量子化¹³：

$$[\psi_r(x_1), \psi_r^\dagger(x_2)]_+ = F_r^{(2n+1)}(\partial_\mu^{(1)})\Delta(x_1 - x_2), \quad 2(j+k) = 2N+1 \quad (16.19)$$

2, 证明充分性分析

i, 定理主要内容是将自旋（整数半整数）与统计（性质）关联起来。单纯从上面证明过程观察，**定理结论直接根源于“Lorentz 变换不变性原理”和“相对论性定域因果律”**¹⁴。于是定理被许多文献书籍说成是相对论性量子场论的重要结论之一，定理的正确性也被说成是相对论性定域因果场论的重要成就，等等。

ii, 其实，上述两个物理基础只是自旋与统计关联成立的充分条件，而非必要条件！对非相对论的 *Schrodinger* 场，由于不存在 *Lorentz* 变换不变性，右边并不是张量形式，上面证明中接下来的推理不再成立。于是出现，一方面，*Schrodinger* 场用对易规则或用反对易规则量子化都能构建逻辑自洽的量子统计理论¹⁵。物理上，这当然是由于非相对论粒子速度 $\beta = v/c \rightarrow 0$ ，已经不存在相对论性定域因果律的提法的缘故（但存在因果律）。另一方面，超低温 *Bose-Einstein* 凝聚中自旋与统计的关联仍然如故。应当说，定理证明并不完善，关联性另有更普遍的依据。

¹³ 附带指出，在上面证明 *Fermion* 时，“令 \vec{r}_1 绕 \vec{r}_2 一周出负号”办法不能直接用于第二行

张量 $F_{rs}^{(2n+1)}$ 等式。因为右边张量含有与旋量场有关的与此种空间转动非对易的常数矩阵。

¹⁴ 当然，定理还有一条数学来源，那就是基于开平方根的运算。参见后面定理分析部分。

¹⁵ 由此也知道，不能从 *Schrodinger* 方程必然地导出 $1/2$ 自旋。见“*QT* 非线性”讲第 IV 节。

iii, 虽然 *Dirac* 方程 4 分量旋量在低能区简化为两分量的简单旋量, 转 2π 仍会出负号! 所以上面 *Fermion* 证明中部分内容仍可以直接用于低能区, 得到不同空间点 $\vec{r}_1 \neq \vec{r}_2$ 的等时反对易子为零。这启示, $1/2$ 自旋情况下, 定理与 2 维开根运算 $\sqrt{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}} = \pm\sigma_i$ ($i = 0, x, y, z$); $\sqrt{e^{i2\pi}} = \pm e^{i\pi}$ 密切相关¹⁶。可以联想一个比喻: 定义在普通曲面环带上的矢量场, 通过开根运算, 结果之一是转向定义在 *Mobius* 带上的旋量场 (见第 8 讲)。总之, *Pauli* 基本定理的物理基础并非就是上述两个相对论性物理要素。考虑到低能区情况尚未被证明所概括, 应当谨慎地说, *Pauli* 基本定理的证明还需要改善, 所以本节标题还是认作第三公设。

iv, 直接计算表明: **复 *K-G* 场不能用反对易规则量子化。**

证明: 复 *Klein-Gordon* 场的展开式为 ($\omega_k = c\sqrt{k^2 + \lambda_c^{-2}}$)

$$\hat{\Phi}(x) = \int \frac{d^3k}{\sqrt{2\omega_k}(2\pi)^3} (a(\vec{k})e^{ikx} + b^+(\vec{k})e^{-ikx})$$

这里, $\lambda_c = \hbar/\mu c$ 是粒子 *Compton* 波长, $(a(\vec{k}), a^+(\vec{k}'))$ 和 $(b(\vec{k}), b^+(\vec{k}'))$ 为正反粒子对。如果设定产生湮灭算符遵从反对易规则:

$$\{a(\vec{k}), a^+(\vec{k}')\} = \delta(\vec{k} - \vec{k}'), \{a(\vec{k}), a(\vec{k}')\} = \{a^+(\vec{k}), a^+(\vec{k}')\} = 0, \text{ 等等}$$

则不等时反对易子为,

$$\begin{aligned} \{\hat{\Phi}(x), \hat{\Phi}(x')\} &= \int \frac{d^3(kk')}{2(2\pi)^3 \sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} \{a(\vec{k})e^{ikx} + b^+(\vec{k})e^{-ikx}, b(\vec{k}')e^{ik'x'} + a^+(\vec{k}')e^{-ik'x'}\} \\ &= \int \frac{d^3(kk')}{2(2\pi)^3 \sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} \left[\{a(\vec{k}), a^+(\vec{k}')\} e^{ikx - ik'x'} + \{b^+(\vec{k}), b(\vec{k}')\} e^{-ikx + ik'x'} \right] \end{aligned}$$

¹⁶ 也可参考 *R.Feynman* 在纪念 *Dirac* 学术会上的报告: 存在反粒子的理由。收入丛书《从反粒子到最终定律》。李培廉译, 湖南科技出版社, 2003 年。

$$\begin{aligned}
&= \int \frac{d^3(kk')}{2(2\pi)^3 \sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} \left[\{a(\vec{k}), a^+(\vec{k}')\} e^{ikx - ik'x'} + \{b^+(\vec{k}), b(\vec{k}')\} e^{-ikx + ik'x'} \right] \\
&= \int \frac{d^3k}{2(2\pi)^3 \omega_k} \left(e^{ik(x-x')} + e^{-ik(x-x')} \right) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 \omega_k} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \cos \omega_k (t - t') = \Delta_1(x - x')
\end{aligned}$$

于是等时情况成为： $t = t'$ 下类空间隔为 $(x - x')^2 = (\vec{r} - \vec{r}')^2 \equiv l^2 > 0$ ，有

$$\begin{aligned}
\Delta_1(x - x')|_{t=t'} &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k}{\sqrt{k^2 + \lambda_c^2}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{\sqrt{k^2 + \lambda_c^2}} \int_0^\pi e^{ikl \cos \theta} \sin \theta d\theta \\
&= \frac{2}{(2\pi)^2 l} \int_0^\infty \frac{k \sin(kl) dk}{\sqrt{k^2 + \lambda_c^2}} = \frac{1}{2\pi^2 \lambda_c l} K_1\left(\frac{l}{\lambda_c}\right) \neq 0 \quad 17
\end{aligned}$$

注意 $\Delta_1(x)$ 是 *Lorentz* 不变函数，于是所得结果最后推广成为，在类空间隔下场算符的反对易子不为零。反过来，如果令类空间隔下场算符的反对易子为零，则显然不能保证产生湮灭算符的反对易规则。总之，对复 *Klein-Gordon* 场，产生湮灭算符的反对易量子化规则和场算符的反对易量子化规则相互不协调，特别是在类空间隔下和相对论性定域因果律矛盾，构造不出定域因果场论！因为，标量场无需二次累就能构成可观测量，类空间隔两点的场量应当彼此对易。

v, 直接计算表明：*Dirac* 场不能用对易规则量子化。

证明：*Dirac* 场展开式为

¹⁷ $\int_0^\infty \frac{k \sin kx dk}{\sqrt{k^2 + \alpha^2}} = \alpha K_1(\alpha x)$ ，见 *M.Abramowitz and I.A.Stegun, Handbook of Mathematical*

Functions, Dover Publications Inc., New York, 1965, P. 376。对那里的 K_0 表达式微商即得。

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi(x) = \int d^3k \sqrt{\frac{mc^2}{E_k}} \sum_{\sigma=1}^2 \left[a_{\sigma}(\vec{k}) u_{\sigma}(\vec{k}) \frac{e^{ikx}}{(2\pi)^{3/2}} + b_{\sigma}^+(\vec{k}) v_{\sigma}(\vec{k}) \frac{e^{-ikx}}{(2\pi)^{3/2}} \right] \\ \equiv \psi^{(+)}(x) + \psi^{(-)}(x) \\ \bar{\psi}(x) = \int d^3k \sqrt{\frac{mc^2}{E_k}} \sum_{\sigma=1}^2 \left[a_{\sigma}^+(\vec{k}) \bar{u}_{\sigma}(\vec{k}) \frac{e^{-ikx}}{(2\pi)^{3/2}} + b_{\sigma}(\vec{k}) \bar{v}_{\sigma}(\vec{k}) \frac{e^{ikx}}{(2\pi)^{3/2}} \right] \\ \equiv \bar{\psi}^{(-)}(x) + \bar{\psi}^{(+)}(x) \end{array} \right.$$

这里 $E_k = \sqrt{\hbar^2 \vec{k}^2 + m^2 c^4}$ 。如果对 *Dirac* 场采用对易规则量子化，则从二次型量的对易子 $[\Omega(x), \Omega(x')] = 0$ 中必定分解出场量的因子

$$\begin{aligned} [\psi_{\alpha}(x), \bar{\psi}_{\beta}(x')] &= [\psi_{\alpha}^{(+)}(x), \bar{\psi}_{\beta}^{(-)}(x')] + [\psi_{\alpha}^{(-)}(x), \bar{\psi}_{\beta}^{(+)}(x')] \\ &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\sigma} \frac{m}{E_k} u_{\sigma}(\vec{k})_{\alpha} \bar{u}_{\sigma}(\vec{k})_{\beta} e^{ik(x-x')} - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\sigma} \frac{m}{E_k} v_{\sigma}(\vec{k})_{\alpha} \bar{v}_{\sigma}(\vec{k})_{\beta} e^{-ik(x-x')} \\ &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2iE_k} \left\{ (\hat{k} + im)_{\alpha\beta} e^{ik(x-x')} - (\hat{k} - im)_{\alpha\beta} e^{-ik(x-x')} \right\} \\ &= -i(\gamma \cdot \partial - m)_{\alpha\beta} [\Delta^{(+)}(x-x') - \Delta^{(-)}(x-x')] \\ &= -(\gamma \cdot \partial - m)_{\alpha\beta} \Delta_1(x-x') = -S_1(x-x')_{\alpha\beta} \end{aligned}$$

在等时情况下，

$$\begin{aligned} S_1(x-x') \Big|_{t=t'} &= (\gamma \cdot \partial - m) \Delta_1(x-x') \Big|_{t=t'} \\ &= i(\gamma \cdot \partial - m) \int \frac{d^3k}{(2\pi)^4} \int_C dk_4 \frac{e^{ik(x-x')}}{k^2 + m^2} \Big|_{t=t'} = i \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{(\vec{\gamma} \cdot \vec{k} + im)}{E_k} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} \neq 0 \end{aligned}$$

由于 S_1 是不变函数，等时不为零就导致任意类空间隔 $(x-x')^2 > 0$ 下不为零。这和相对论性定域因果律相违背。

vi, 最后再补充 Fermion 必须用反对易子量子化的理由。 对旋量场，不论用对易子或反对易子，场平均能量表达式转到粒子数表象时，*Hamiltonian* 总是得到下面形式 ($E_k = \hbar\omega_k = \sqrt{\hbar^2 \vec{k}^2 + m^2 c^4}$)：

$$H = \int d\vec{r} \psi^{\dagger}(\vec{r}t) i\hbar \partial_t \psi(\vec{r}t) = \int d\vec{k} E_k \sum_{\sigma=1}^2 \left\{ a_{\sigma}^{\dagger}(\vec{k}) a_{\sigma}(\vec{k}) - b_{\sigma}(\vec{k}) b_{\sigma}^{\dagger}(\vec{k}) \right\}$$

到此，这里只能采用反对易子量子化。如此第二项就化为

$$-b_{\sigma}(\vec{k})b_{\sigma}^+(\vec{k})=b_{\sigma}^+(\vec{k})b_{\sigma}(\vec{k})-[b_{\sigma}(\vec{k}),b_{\sigma}^+(\vec{k})]_{+}$$

再按重整化思想减除反对易子积分的无穷大常数，也就是保证所有量子系统都必须有自己的基态。一般地说，无任何粒子的真空态，其能量应当能够定义为零，也就是常说的，应当使自由粒子的能量是正定的。但如果对结果采用对易子量子化，第二项将成为

$$-b_{\sigma}(\vec{k})b_{\sigma}^+(\vec{k})=-b_{\sigma}^+(\vec{k})b_{\sigma}(\vec{k})-[b_{\sigma}(\vec{k}),b_{\sigma}^+(\vec{k})]_{+}$$

这里 $b_{\sigma}^+(\vec{k})b_{\sigma}(\vec{k})=N_{\sigma}$ 是反粒子数算符。于是，随着反粒子数无限增多，系统总能量原则上没有下限！即便减除对易子积分的无穷大常数，真空态也不能成为系统的基态。这个结果是量子理论所不能容忍的(也参见下讲)。