第18卷 第11期
1962 年 11 月

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 18, No. 11
November, 1962

統計物理中的一个新表象*

I. Γ^2 表象的数学結构

陈 春 先

提 要

本文引入扩大的希柏特空間 $\Gamma^2 \equiv \Gamma \times \Gamma$，証明在其中对混合統計系綜的平均值蛻化为对某一量子态的平均，并給出了新表象中諸矩陣的具体形式。統計微扰論中的 Wick-Bloch 定理是 Γ^2 空間中矩陣本身性質的必然推論。

§1. 引 言

近年来，量子統計的計算方法进展很大．由于对自由体系的系綜平均满足类似 Wick 定理的代数关系式，量子場論中微扰論和費曼图方法可广泛用于量子統計的微扰計算[1,2]，并已取得不少具体成果．在研究統計微扰論中級数的构造时，作者曾建議了一种統計模拟方法[3]，其实質为：由相互作用引起的热力学函数改变可用一专門設計的模拟系統的基态能量移动来代換．这是一般新式微扰論的另一种表現形式，在具体計算中有方便之处．在文献[4]中进一步发展了这种方法，研究了模拟系統的性質；在文献[5]中应用这种方法計算了电子气的热力学函数．值得注意的是：定义模拟系統的么正变換引入了为数多一倍的新算符，因而希柏特空間有了扩大．当时，这一变換是作为处理微扰論級数的工具而提出的．

然而，对以上方法数学結构深入一步的研究表明：使希柏特空間扩大的么正变換是与微扰論完全无关的代数操作．实質上，我們过渡到量子統計中一个新的表象．本文中将証明以下一般事实：在扩大了的希柏特空間中对任何混合系綜的平均都可化为对純粹系綜平均的形式(即对某一量子态的平均)．在第二节中将証明基本数学定理，并討論在新表象中的主軸变換．在第三、四节中将詳細分析新表象中諸矩陣在反对称和对称独立基矢組成的子空間中的結构和具体进行計算的方法．

从这一表象出发可以很方便地建立各种形式的統計微扰論．Wick-Bloch 定理将成为明显的必然推論．在这一表象中便于审查和驗証由于应用 Wick-C. Bloch 定理处理統計微扰論級数带来的一系列問題(見文献[6]及有关的討論)．新表象可能对討論趋向平衡等原则性問題亦有帮助．本文的任务是詳細論述表象本身的数学結构，其具体运用将在以后論文中討論．

* 1962 年 6 月 7 日收到．

§2. Γ^2 表 象

在量子統計中一般通过密度矩陣来求出对混合系綜的平均. 現在証明，可以引入和原有形式等价的新表象，其中密度矩陣蜕化为投影算符，而系綜平均变为对某一量子态的平均. 換言之，在新表象中对一切系綜的平均都具有純粹系綜的形式. 关鍵在于把原来的希柏特空間扩大到自乘积空間. 設所研究量子体系原来定义于希柏特空間 Γ，則新表象定义于空間 $\Gamma^2 \equiv \Gamma \times \Gamma$，故称之 Γ^2 表象[1].

根据 Von Neumann 引入密度矩陣的形式[7]，任一表征力学量的厄密算符可表示为投影算符的組合. 設 A 为希柏特空間 Γ 中的厄密算符，在 Γ 中选取一組任意的完全正交归一基矢 $|n\rangle$，則有

$$A \equiv \sum_{mn} A_{mn}E^{mn} \equiv \sum_{mn} A_{mn}|m\rangle\langle n|, \tag{1}$$

其中 $A_{mn} = \langle m|A|n\rangle$ 为算符 A 的矩陣元，$E^{mn} = (E^{nm})^+$ 为厄米算符矩陣. 对 A 进行某种統計系綜的平均后，

$$\overline{A} = \sum_{mn} A_{mn}\overline{E^{mn}} \equiv \sum_{mn} A_{mn}\rho_{nm} = \mathrm{Sp}[A\rho], \tag{2}$$

ρ 就是一般的密度矩陣，它只决定于系綜的結构，而与算符 A 无关. ρ 有下列性質（数学証明見文献[7]）:

(1) ρ 为厄密 $\rho_{nm} = \rho^*_{mn}$.

(2) ρ 为正算符，其本征值 $w_i \geqslant 0$. 故可定义数符 u，使 $u^2 = \rho$，u 的本征值为 $\sqrt{w_i} \geqslant 0$. w_i 为实数.

(3) 取归一条件 $\mathrm{Sp}[\rho] = 1$，故 $\sum_i w_i = 1$. 当 $\mathrm{Sp}[\rho]$ 不存在时，(2)式理解为相对几率.

(4) 对应純粹系綜的 ρ 为投影算符，$\rho = P_{|\phi\rangle}$，$\langle\phi|\phi\rangle = 1$，$\mathrm{Sp}[A\rho] = \langle\phi|A|\phi\rangle$.

(1)(2)式以及上面四項性質构成量子統計数学体系的基础. 現在証明，它們可以通过另一等价形式表現出来. 由(2)式

$$\overline{A} = \sum_{\substack{mn\\kli}} A_{mn}u_{kl}(E^{mn})_{li}u_{ik} = \sum_{mnk} A_{mn}u^*_{mk}u_{nk}. \tag{3}$$

引入 $\Gamma^2 \equiv \Gamma \times \Gamma$ 空間，其基矢为 $|nm\rangle \equiv |n\rangle \times |m\rangle$. 如果定义 A 在 Γ^2 中矩陣元 $A_{mi,nj} \equiv A_{mn}\delta_{ij}$，則(3)式可化为

$$\overline{A} = \sum_{mnij} A_{mi,nj}u^*_{mi}u_{nj} \equiv \mathrm{Sp}\,(AP), \tag{4}$$

其中 P 为 Γ^2 空間中的厄密算符:

$$P_{ni,mj} \equiv u_{ni}u^*_{mj} = (uE^{mn}u)_{ij} = P^*_{mj,ni}.$$

不难看出，(4)为对純粹系綜的平均，即对 Γ^2 中 $|\phi_F\rangle$ 态的平均，而 P 是投影算符，因为

$$(P^2)_{mi,nj} = \sum_{kl} u_{mi}u^*_{kl}u_{kl}u^*_{nj} = u_{mi}u^*_{nj} = (P)_{mi,nj},$$

---

1) 完成本文后，作者得知在泛函分析中对希柏特空間的扩大和自伴算符的蜕化問題已有一般的研究，見文献[8].

$$|\phi_F\rangle = \sum_{mi} |mi\rangle u_{mi}.$$

因此，我們証明了：

$$\bar{A} = \underbrace{\mathrm{Sp}\,[A\rho]}_{\text{在}\,\Gamma\,\text{空間}} = \underbrace{\mathrm{Sp}\,[AP] = \langle\phi_F|A|\phi_F\rangle}_{\text{在}\,\Gamma^2\,\text{空間}}. \tag{5}$$

到此为止，基矢的选择是任意的．以下通过相应的主軸变换过渡到特殊的“坐标系”而使(5)式的結构簡化．

首先考虑在 Γ 空間中 ρ 的对角化表象 $|c_j\rangle$: $u|c_j\rangle = \sqrt{w_j}|c_j\rangle$．設主軸变换矩陣为 v，

$$(v^{-1}uv)_{ij} = \sqrt{w_i}\delta_{ij},$$

$$v_{nj} = \langle n|c_j\rangle = (v_{jn}^{-1})^* \quad |n\rangle = \sum_j v_{jn}^{-1}|c_j\rangle.$$

在 Γ^2 空間定义 $|c_{ij}\rangle = |c_i\rangle \times |c_j\rangle$，相应的么正变换为

$$\left.\begin{aligned} &(V^{-1}PV)_{ij,kl} \equiv P'_{ij,kl} = \delta_{ij}\delta_{kl}\sqrt{w_iw_k} \\ &(V^{-1}_{mnkl})^* = v_{km}v_{ln}^* = V_{kl,mn}, \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

这时

$$|\phi'_F\rangle = \sum_{ij} \sqrt{w_i}\delta_{ij}|c_{ij}\rangle. \tag{7}$$

在这一表象中 P 还不是对角矩陣．在 Γ^2 空間中引入 P 的对角表象，設其基矢为 $|F^{\alpha\beta}\rangle$．由 $\mathrm{Sp}\,[P] = 1$ 可知，在对角表象中 P 的諸对角元除其中一个等于 1 外，其他均为零，这是多重簡并化的情况．設由 $|c_{ij}\rangle$ 过渡到 $|F^{\alpha\beta}\rangle$ 的么正变换为 W，则

$$(W^{-1}P'W)_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\alpha1}\delta_{\gamma\delta}\delta_{\gamma1}, \quad W_{ij,\alpha\beta} = \langle c_{ij}|F^{\alpha\beta}\rangle,$$

其中我們已令 $|F^{11}\rangle$ 为本征值为 1 的态．相应的方程和久期行列式为

$$\delta_{ij}\sum_{kl} \sqrt{w_iw_k}\delta_{kl}F_{kl} = \lambda F_{ij}, \tag{8}$$

$$\begin{vmatrix} w_1 - \lambda & \sqrt{w_1w_2} & \cdots \\ \sqrt{w_1w_2} & w_2 - \lambda & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix} = 0.$$

由(8)可得

$$(1-\lambda)\sum_i \sqrt{w_i}F_{ii} = 0. \tag{9}$$

故証实唯一不为零的本征值是 1 ($\lambda^{11} = 1$)．其他的 $\lambda^{\alpha\beta} = 0$($\alpha \neq 1$ 或 $\beta \neq 1$)，对相应的 $|F^{\alpha\beta}\rangle$ 只要满足正交归一条件，因对应本征值为零的情况，方程(8)蜕化为

$$\sum_{kl} \sqrt{w_k}\delta_{kl}F_{kl}^{\alpha\beta} = \langle F^{11}|F^{\alpha\beta}\rangle = 0, \quad (\alpha \neq 1 \text{ 或 } \beta \neq 1),$$

这正是簡并化的必然結果．

在 $|F^{\alpha\beta}\rangle$ 表象中，

$$\begin{aligned} &P''_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\alpha1}\delta_{\gamma\delta}\delta_{\gamma1}, \\ &|\Phi''_F\rangle = |F^{11}\rangle. \end{aligned} \tag{10}$$

本节的全部內容可概括为下式

$$\overline{A} = \mathrm{Sp}\,[A\rho] = \mathrm{Sp}\,[AP] = \mathrm{Sp}\,[AVWP''W^{-1}V^{-1}], \tag{11}$$

利用陣迹的輪换不变性:

$$\overline{A} = \mathrm{Sp}[A''P''] = \langle \mathbf{F}^{11} | A'' | \mathbf{F}^{11} \rangle \tag{12}$$

其中

$$A'' = W^{-1}V^{-1}AVW.$$

在实际計算中常用(12)式，卽先对 A 进行一系列的么正变换，然后对 $|F^{11}\rangle$ 态平均．在附录中将列出 Γ^2 空間中諸矩陣的具体形式．

§3. 反对称独立基矢

为了利用上述一般形式于具体計算，必須具体写出 Γ^2 空間中諸矩陣．当整个体系的量子态可表达为对应独立自由度的“单体”波函数的乘积时，上节公式变得特别簡单．按照現代多体理論的观点，这些独立状态并不必是眞正的自由粒子态，而是相互作用体系中可近似分出的独立自由度．对应多体系統能量較低的激发态，我們可以引入元激发的概念．这些就是我們的独立状态．关鍵在于密度矩陣分解为对应諸独立态因子的乘积．换言之，各独立态实現的几率是不相干的．在量子統計中不能使用整个 Γ 空間，而只是由对称和反对称波函数組成的子空間．其中基矢是独立状态波函数的对称化式反对称化乘积所組成的．

令独立状态为 $|1\rangle|2\rangle\cdots|j\rangle\cdots$，则系統的波函数为 $N!^{-\frac{1}{2}}\sum\limits_{P}(-1)^P\prod\limits_{j}|j\rangle$ 的綫性組合．过渡到 $|j\rangle$ 态上的占有数表象，在反对称子空間中的独立基矢为

$$|n\rangle \equiv |n_1n_2\cdots n_j\cdots\rangle = \left\{\prod_j (a_j^\dagger)^{n_j}\right\}|0\rangle,$$

其中 $n_j = 0, 1$，为 $|j\rangle$ 态上的粒子数，$a_j^\dagger$, a_j 为費米算符，$|0\rangle$ 为“眞空”态．

这时

$$\rho_{n'n} = \langle\cdots n_j'\cdots|\rho|\cdots n_j\cdots\rangle = \prod_j w(n_j)\delta_{n_j'n_j},$$

$$u_{n'n} = \prod_j \sqrt{w(n_j)}\,\delta_{n_j'n_j}. \tag{13}$$

引入 Γ^2 空間的基矢

$$\begin{aligned}|nm\rangle = |n\rangle\times|m\rangle &= |n_1\cdots n_j\cdots;m_1\cdots m_j\cdots\rangle\\ &= \left\{\prod_j (a_j^\dagger)^{n_j}(d_j^\dagger)^{m_j}\right\}|0\rangle,\\ &\qquad n_j = 0, 1,\\ &\qquad m_j = 0, 1,\end{aligned}$$

其中新引入算符 d_j, $d_j^\dagger$，它們和 $a_ja_j^\dagger$ 一起共同滿足費米交换关系．容易看出，d_j, $d_j^\dagger$ 的引入正好使 Γ 空間扩大到 $\Gamma\times\Gamma$ 空間．在有限空間中这更加明显．設 $j = 1,2,3,\cdots N$，則 $|n_1, n_2, \cdots n_N\rangle$ 构成 2^N 維空間中的基矢，而 $|n_1\cdots n_N;m_1\cdots m_N\rangle$ 正好是乘积空間(其維数是 2^{2N})中的基矢．由(13)式可得

$$P_{n'm',nm} = \prod_j \delta_{n_j'm_j'}\delta_{n_jm_j}\sqrt{w(n_j')w(n_j)}, \tag{14}$$

$$|\phi_F\rangle = \sum_{m_j n_j}\left\{\prod_j \sqrt{w(n_j)}\,\delta_{n_j m_j}\right\}|n_1\cdots n_j\cdots;\ m_1\cdots m_j\cdots\rangle. \tag{15}$$

現在通过主軸变换过渡到P的对角表象$|F^{\alpha\beta}\rangle$. 因为P可分解为对应不同$|j\rangle$态投影算符p_j的直接乘积,故对角化过程亦可对不同独立态$|j\rangle$分别地进行(么正变换矩陣也分解为相应因子的直接积).

$$P = p_1 \times p_2 \times \cdots,$$
$$W = w_1 \times w_2 \times \cdots,$$

其中 $(p)_{n_j'm_j',n_jm_j} = \delta_{n_j'm_j'}\delta_{n_jm_j}\sqrt{w(n_j')w(n_j)}$.

具体写出对角化矩陣方程:

$$w_j^{-1}p_jw_j = w_j^{-1}\begin{pmatrix} \cos^2\gamma_j & 0 & 0 & \cos\gamma_j\sin\gamma_j \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cos\gamma_j\sin\gamma_j & 0 & 0 & \sin^2\gamma_j \end{pmatrix} w_j$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \equiv e_j, \qquad \begin{aligned} \cos^2\gamma_j &\equiv W(0), \\ \sin^2\gamma_j &\equiv W(1), \end{aligned} \tag{16}$$

解相应的久期方程后,不难求得

$$w_j = \begin{pmatrix} \cos\gamma_j & 0 & 0 & -\sin\gamma_j \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \sin\gamma_j & 0 & 0 & \cos\gamma_j \end{pmatrix} = e^{(a_j^+d_j^+ - d_ja_j)\gamma_j} \equiv e^{-i\sigma_j^y\gamma_j},$$

$$w_j^{-1} = \begin{pmatrix} \cos\gamma_j & 0 & 0 & \sin\gamma_j \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\sin\gamma_j & 0 & 0 & \cos\gamma_j \end{pmatrix} = e^{-(a_j^+d_j^+ - d_ja_j)\gamma_j} \equiv e^{i\sigma_j^y\gamma_j},$$

因此,我們求得

$$P'' = e_1 \times e_2 \cdots \times e_j \times \cdots = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 0 & & & \\ & & 0 & & \\ & & & 0 & \\ & & & & \cdots \end{pmatrix}.$$

根据(12)式

$$\left.\begin{aligned} \bar{A} &= \mathrm{Sp}(A''P'') = \langle 0|W^{-1}AW|0\rangle, \\ W &= \prod_j e^{-i\sigma_j^y\gamma_j}, \\ |\phi_F\rangle &= W|0\rangle = \prod_j(\cos\gamma_j + \sin\gamma_j a_j^+d_j^+)|0\rangle, \end{aligned}\right\} \tag{17}$$

如

$$A = a_1 a_2 \cdots a_r a^+_{r+1} \cdots a^+_s,$$
$$A'' = a_1'' a_2'' \cdots a_r'' \overset{+}{a}{}''_{r+1} \cdots \overset{+}{a}{}''_s = W^{-1} A W,$$

其中

$$\begin{aligned} a_j'' &= e^{i\sigma_j^y \gamma_j} a_j e^{-i\sigma_j^y \gamma_j} = a_j \cos\gamma_j + d_j^+ \sin\gamma_j, \\ \overset{+}{a}{}_j'' &= e^{i\sigma_j^y \gamma_j} a_j^+ e^{-i\sigma_j^y \gamma_j} = a_j^+ \cos\gamma_j + d_j \sin\gamma_j. \end{aligned} \tag{18}$$

同样可得

$$\begin{aligned} d_j'' &= d_j \cos\gamma_j - a_j^+ \sin\gamma_j, \\ \overset{+}{d}{}_j'' &= d_j^+ \cos\gamma_j - a_j \sin\gamma_j. \end{aligned} \tag{19}$$

将(18)代入(19)中，得到

$$\begin{aligned} \bar{A} &= \mathrm{Sp}(A\rho) = \langle 0 | A'' | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | a_1'' \cdots a_r'' \overset{+}{a}{}''_{r+1} \cdots \overset{+}{a}{}''_s | 0 \rangle \\ &= \sum_P (-1)^P \underbracket{a_1'' \overset{+}{a}{}_1''} \cdot \underbracket{a_2'' \overset{+}{a}{}_2''} \cdots, \end{aligned} \tag{20}$$

其中 $\underbracket{a_j'' \overset{+}{a}{}_j''} = \langle 0 | a_j'' \overset{+}{a}{}_j'' | 0 \rangle = \cos^2\gamma_j \equiv w(0)$.

在此情况下，Wick-Bloch 定理由 (17)，(18) 式自然推出．然而，当对应同一状态的 a_j 多次出現时，則情况并不如文献 [2] 中所討論的那样簡单．这点在証明相連图形展开 (Linked cluster expansion) 公式时特别重要．从本节的公式出发将更容易弄清这一問題．

§4. 对称独立基矢

現在考慮对称独立基矢情况．在占有数表象

$$|n\rangle \equiv |n_1 \cdots n_j \cdots\rangle = \left\{ \prod_j (n_j!)^{-\frac{1}{2}} (b_j^+)^{n_j} \right\} |0\rangle$$

构成完全正交归一的独立基矢系，其中 b_j^+, b_j 为玻色算符，$n_j = 0, 1, 2, \cdots$．扩大到 Γ^2 空間，引入新的基矢：

$$\begin{aligned} |nm\rangle &\equiv |n_1 \cdots n_j \cdots; m_1 \cdots m_j \cdots\rangle \\ &= \left\{ \prod_j (n_j! m_j!)^{-\frac{1}{2}} (b_j^+)^{n_j} (c_j^+)^{m_j} \right\} |0\rangle, \end{aligned}$$

其中 c_j^+, c_j, 为另一組新的玻色算符；c_j^+, c_j, b_j^+, b_j 共同满足玻色交换关系．以下討論和反对称基矢情况完全平行，密度矩陣亦可写为 (13) 式形式，而算符 P 和 $|\phi_F\rangle$ 亦可表为 (14)，(15)． 由几率独立条件可以推出，P 的对角化过程亦可如上节中分别对不同的态 $|j\rangle$ 进行．然而，由于 n_j 可取一切正整数值，具体写出 W_j 的形式是十分困难的，至少上节中的原始方法是不适用了．

現在专門討論 p_j 的对角化方法(其中符号和上节相同)：

$$w_j^{-1} p_j w_j = e_j, \tag{21}$$

$$(p_j)_{n_j' m_j'; n_j m_j} = \delta_{n_j' m_j'} \delta_{n_j m_j} \sqrt{w(n_j) w(n_j')}.$$

作么正算符 w_j，使

$$\langle n_j m_j | w_j | 00 \rangle = \delta_{n_j m_j} \sqrt{w(n_j)}, \tag{22}$$

不难看出，w_j 正是我們要求的对角化么正变换．为此，把(22)代入(21)中，得到

$$
\begin{aligned}
&\langle n_j'm_j'|w_j^+p_jw_j|n_jm_j\rangle \\
&\quad = \sum_{\substack{n_j''m_j''\\ n_j'''m_j'''}} \langle n_j'm_j'|w_j^+|n_j''m_j''\rangle \sqrt{w(n_j'')w(n_j''')}\,\delta_{n_j''m_j''}\delta_{n_j'''m_j'''} \times \\
&\qquad \times \langle n_j'''m_j'''|w_j|n_jm_j\rangle \\
&\quad = \sum_{\substack{n_j''m_j''\\ n_j'''m_j'''}} \langle n_j'm_j'|w_j^+|n_j''m_j''\rangle\langle n_j''m_j''|w_i|00\rangle \times \\
&\qquad \times \langle 00|w_j^+|n_j'''m_j'''\rangle\langle n_j'''m_j'''|w_j|n_jm_j\rangle \\
&\quad = \langle n_j'm_j'|00\rangle\langle 00|n_jm_j\rangle = (e_j)_{n_j'm_j';\, n_jm_j}.
\end{aligned}
$$

因此，e_j 确为对角矩陣，而且只有一个不为零的对角矩陣元 $\langle 00|w_i^{-1}p_jw_j|00\rangle = 1$. 由于对 w 的选择在其他方面是任意的，我們可仿上节中选为繞 y 軸作有限轉动的形式：

$$
w_j = e^{-i\sigma_j^y\gamma_j} \quad \sigma_j^y = i(b_j^+c_j^+ - c_jb_j). \tag{23}
$$

这时，(22)就成为决定未知函数 γ_i 的方程組. 令

$$
\langle n_jm_j|w_j|00\rangle = \delta_{n_jm_j}f_{n_j}(\gamma_j),
$$

(22) 式就是 $f_{n_j}(\gamma_j) = \sqrt{w(n_j)}$. 为了具体算出 $f_{n_j}(\gamma_j)$，利用 b 和 c 的交換关系，作 $f_{n_j}(\gamma_j)$ 所满足的微分方程組.

$$
\frac{\partial}{\partial\gamma_j}f_{n_j}(\gamma_j) = -i\langle n_jn_j|\sigma_j^y e^{-i\sigma_j^y\gamma_j}|00\rangle = n_jf_{n_j-1}(\gamma_j) - (n_j+1)f_{n_j+1}(\gamma_j), \tag{24}
$$

及相应的边界条件

$$
f_{n_j}(0) = \delta_{n_j0}.
$$

試作代換 $f_{n_j}(\gamma_j) = a(\gamma_j)\varphi(\gamma_j)^{n_j}$, 其中 $a(\gamma_j)$ 可由归一化条件定出：

$$
a(\gamma_j) = \sqrt{1-\varphi(\gamma_j)^2}.
$$

代入(24)式以后

$$
[\varphi'(\gamma_j) - (1-\varphi^2(\gamma_j))]\,[n_j(1-\varphi^2(\gamma_j)) - \varphi^2(\gamma_j)] = 0, \quad n_j = 0, 1, 2, \cdots
$$

不难看出方程(24)的解为

$$
f_{n_j}(\gamma_j) = \mathrm{Sch}\,\gamma_j\,\mathrm{th}^{n_j}\,\gamma_j = \sqrt{w(n_j)}.
$$

在自由巨正則系綜情况下，

$$
W(n_j) = e^{-\beta\varepsilon_jn_j}(1-e^{-\beta\varepsilon_j}),
$$

故有

$$
\mathrm{th}\,\gamma_j = e^{-\beta\varepsilon_j/2} \tag{25}
$$

现在就可以导出全部具体进行平均的公式. 仿(17)式可得

$$
\begin{aligned}
&\bar{A} = \mathrm{Sp}\,[A''P''] = \langle 0|W^{-1}AW|0\rangle, \qquad (26)\\
&W = \prod_i e^{-i\sigma_j^y\gamma_j},\\
&|\phi_F\rangle = \prod_j e^{-i\sigma_j^y\gamma_j}|0\rangle = \sum_{n_jm_j}\prod_j \sqrt{w(n_j)}\,\delta_{n_jm_j}|n_jm_j\rangle,
\end{aligned}
$$

設 A 为 b_i 和 b_j^+ 的乘积，則有

$$\bar{A} = \langle 0|\cdots b_j''\cdots \overset{+}{b}_{j'}''\cdots|0\rangle, \tag{27}$$

其中

$$\begin{aligned} b_j'' &= e^{i\sigma_j^y\gamma_j} b_j e^{-i\sigma_j^y\gamma_j} = \mathrm{ch}\,\gamma_j b_j + \mathrm{sh}\,\gamma_j c_j^+, \\ \overset{+}{b}_j'' &= e^{i\sigma_j^y\gamma_j} b_j^+ e^{-i\sigma_j^y\gamma_j} = \mathrm{ch}\,\gamma_j b_j^+ + \mathrm{sh}\,\gamma_j c_j. \end{aligned} \tag{28}$$

同样,

$$\begin{aligned} c_j'' &= e^{i\sigma_j^y\gamma_j} c_j e^{-i\sigma_j^y\gamma_j} = \mathrm{ch}\,\gamma_j c_j + \mathrm{sh}\gamma_j b_j^+, \\ \overset{+}{c}_j'' &= e^{i\sigma_j^y\gamma_j} c_j^+ e^{-i\sigma_j^y\gamma_j} = \mathrm{ch}\,\gamma_j c_j^+ + \mathrm{sh}\gamma_j b_j. \end{aligned} \tag{29}$$

在巨正則系綜情况下,

$$\begin{aligned} \mathrm{sh}\,\gamma_j &= \frac{1}{\sqrt{\mathrm{cth}^2\gamma_j - 1}} = \left(\frac{1}{e^{-\beta\varepsilon_j} - 1}\right)^{\frac{1}{2}} \equiv h(j)^{\frac{1}{2}}, \\ \mathrm{ch}\,\gamma_j &= \sqrt{1 + \mathrm{sh}^2\gamma_j} \equiv (1 + h(j))^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \tag{30}$$

由(27)和(28)直接得出 Wick-Bloch 定理:即 $\bar{A}$ 化为一切可能配对乘积之和,而且配对可由(27)定出

$$\begin{aligned} \underbrace{b_j\, b_j^+} &= \mathrm{ch}^2\gamma_j = (1 + h(j)), \\ \underbrace{b_j^+ b_j} &= \mathrm{sh}^2\gamma_j = h(j). \end{aligned} \tag{31}$$

§5. 結 論

(1) 本文中一般地証明了:当由原来体系的希柏特空間 Γ 扩大到自乘积空間 $\Gamma^2 \equiv \Gamma \times \Gamma$, 对任何統計系綜的平均都可化为对 Γ^2 空間中某一波函数的平均,即具有純粹系綜的形式.

(2) 当 Γ^2 空間中的基矢可选为对称或反对称独立基矢时,計算可进行到底,并推出么正变換矩陣的具体結构. 在实际計算中,一般是先对要平均的算符 A 进行么正变换(18)或(28),然后对真空态平均,所得結果就和对系綜进行統計平均相等.

(3) Wick-Bloch 定理在簡单情况下就是(18)和(28)的直接推論. 从 Γ^2 表象出发,便于审查和驗証运用該定理进行計算时发生的問題.

附录: Γ^2 空間中諸矩陣的具体构造

$$A = A^{(1)} \dotplus A^{(2)} \dotplus \cdots \dotplus A^{(j)} \dotplus \cdots = \begin{vmatrix} A_{mn} & 0 & 0 \\ 0 & A_{mn} & 0 \\ 0 & 0 & A_{mn} \end{vmatrix},$$

$$P = \begin{vmatrix} P_{11} & P_{12} & \cdots \\ P_{21} & P_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix},$$

$$P' = \begin{vmatrix} P'_{11} & P'_{12} & \cdots \\ P'_{21} & P'_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix},$$

$$P'' = \begin{vmatrix} P''_{11} \, P''_{12} \cdots \\ P''_{21} \, P''_{22} \cdots \\ \cdots\cdots\cdots \end{vmatrix},$$

其中 $P_{ij} P'_{ij} P''_{ij}$ 都是矩陣，其矩陣元为

$$(\boldsymbol{P}_{ij})_{lk} = \boldsymbol{u}_{li} \boldsymbol{u}^*_{kj},$$
$$(\boldsymbol{P}'_{ij})_{lk} = \delta_{li}\delta_{jk}\sqrt{w_l w_k},$$
$$(P''_{ij})_{lk} = \delta_{li}\delta_{jk}\delta_{l1}\delta_{k1}.$$

参 考 文 献

[1] Matsubara, T., *Progr. Theor. Phys.*, **14** (1955), 351.
[2] Bloch, C. & Dominicis, C., *Nucl. Phys.*, **7** (1958), 459.
[3] Чэнь Чунь-сянь (陈春先), *ЖЭТФ*, **35** (1958), 1518.
[4] 陈春先、陈式刚，物理学报，**17** (1961), 77. (SCIENTIA SINICA (中国科学) **10** (1961), 637).
[5] 刘大乾、冷忠昂、陈春先、潘少华，物理学报，**15** (1959), 664.
[6] Kohn, W. & Luttinger, J. M., *Phys. Rev.*, **118** (1960), 41.
[7] Von Neumann, J., Mathematical Foundations of Quantum Mechanics, (1955).
[8] Bela Sz-Nagy, Extensions of Linear Transformations in Hilbert Space which extend beyond this space. New York, 1960.

ОБ ОДНОМ НОВОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ

I. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА Γ^2-ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

Чэнь Чунь-сянь

Резюме

В работе введено расширенное пространство Гильберта $\Gamma^2 \equiv \Gamma \times \Gamma$, в котором среднее по смещенному статистическому ансамблю вырождается в среднее по некоторому квантовому состоянию, выведены конкретные формы матриц унитарных преобразований в новом представлении. Теорема Вика-Блоха вытекает из свойств матриц в Γ^2-Пространстве как естественное следствие.