国 防 科 技 大 学 学 报
JOURNAL OF NATIONAL UNIVERSITY OF DEFENSE TECHNOLOGY
一九八五年第三期　总第五十一期　　　　No.3 1985　Sum. 51

# 二体算符矩阵元的一个注记

陈　健　华

**提　要**　本文补充了文献[1]中遗漏的二体算符矩阵元，包括玻色子$(\beta,\gamma)\to(\alpha,\alpha)$，$(\alpha,\alpha)\to(\beta,\gamma)$，$(\alpha,\alpha)\to(\alpha,\beta)$，$(\alpha,\beta)\to(\beta,\beta)$，$(\alpha,\gamma)\to(\gamma,\beta)$跃迁矩阵元和费米子$(\alpha,\gamma)\to(\gamma,\beta)$跃迁矩阵元，并给出了无遗漏地计算二体算符全部非零矩阵元的简便方法。本文结果与 Stater-Condon 规则一致[2-4]，并已用于研究生《高等量子力学》教学。

## 一、

曾谨言教授编著，科学出版社1981年出版的现代物理学丛书《量子力学》[1]，内容丰富，不少学校选为本科生或研究生教材或参考书，也是本校研究生《高等量子力学》课教材之一，对其中的疏忽或遗漏作个注记，提供讨论是有益的。该书第十五章（二次量子化方法）第二、三两节分别专门讨论玻色子、费米子的单体、二体算符的表达式及矩阵元，并说：

"由于$\hat{G}$为二体算符，初态和末态最多可以差两个单粒子态，否则矩阵元为零。以下分三种情况讨论：

1°初、末态完全相同，即求$\hat{G}$的平均值，

2°初、末态差两个单粒子态，

3°初、末态差一个单粒子态。"（P543）

可见[1]是试图给出二体算符全部非零矩阵元的。

对第一种情况，该书给出了正确的表达式。

对第二种情况，即初、末态差两个单粒子态，对玻色子该书误认为"只有当粒子(1,2)初态处于不同的单粒子态$(k,k')$而在末态中处于不同的单粒子态$(i,i')$时"矩阵元才可能不为零，而疏忽了初态处于相同单粒子态$(k,k)$而末态处于不同的单子态$(i,i')$的矩阵元，即$(k,k)\to(i,i')$跃迁矩阵元也不为零：

$$\langle\cdots n_{i'}\cdots n_{k-2}\cdots n_i\cdots|\hat{G}|\cdots n_{i-1}\cdots n_k\cdots n_{i'-1}\cdots\rangle$$

$$=[n_i n_{i'} n_k(n_k-1)]^{\frac{1}{2}}g_{ii'kk} \tag{1}$$

本文1985年2月18日收到

（本文全部使用[1]中符号，不再说明）

也就忽了初态处于不同单粒子态$(k,k')$而末态处于相同的单粒子态$(i,i)$的矩阵元，即$(k,k')\to(i,i)$跃迁矩阵元：

$$\langle\cdots n_k'-1\cdots n_i\cdots n_k-1\cdots|\hat{G}|\cdots n_k\cdots n_i-2\cdots n_k'\cdots\rangle$$
$$=[n_i(n_i-1)n_kn_k']^{\frac{1}{2}}g_{iikk'} \tag{2}$$

之所以要特别给出$(k,k)\to(i,i')$(1)式，$(k,k')\to(i,i)$(2)式，是因为(1)、(2)与$(k,k')\to(i,i')$跃迁矩阵元

$$\langle\cdots n_i'-1\cdots n_i'\cdots n_k-1\cdots n_i\cdots|\hat{G}|\cdots n_i-1\cdots n_k\cdots n_i'-1\cdots n_k\cdots\rangle$$
$$=(n_in_kn_i'n_k')^{\frac{1}{2}}(g_{ii'k'k}+g_{ii'kk'})\quad \text{(P546 (16) 式)} \tag{3}$$

是互不相同的，即不能从(3)式令$i'=i$得(2)式，也不能从(3)式令$k=k'$得到(1)式，故给出(1)、(2)是必要的。

对费米子情况，不存在(1)、(2)式所列情况，[1]沒有遗漏。

第三种情况，即初、末态差一个单粒子态，[1]给出了玻色子$(k,k)\to(i,i)$的跃迁矩阵元（P546, (17)式）：

$$\langle\cdots n_k-2\cdots n_i\cdots|\hat{G}|\cdots n_i-2\cdots n_k\cdots\rangle$$
$$=\frac{1}{2}[n_i(n_i-1)n_k(n_k-1)]^{\frac{1}{2}}g_{ii,kk}$$

但是[1]遗漏了玻色子$(k,k)\to(k,i)$, $(k,i)\to(i,i)$, $(k,k')\to(k',i)$的跃迁矩阵元

$$\langle\cdots n_i\cdots n_k-1\cdots|\hat{G}|\cdots n_k\cdots n_i-1\cdots\rangle$$
$$=\sqrt{n_in_k}\,[n_ig_{iiik}+(n_k-1)g_{ikkk}+\sum_{k'\neq k,i}n_{k'}(g_{ik'k'k}+g_{ik'kk'})] \tag{4}$$

对费米子，[1]误认为沒有单粒子跃迁，遗漏了$(k,k')\to(k',i)$的跃迁矩阵元

$$\langle\cdots n_i\cdots n_k-1\cdots|\hat{G}|\cdots n_k\cdots n_i-1\cdots\rangle$$
$$=(-1)^{\delta}\sum_{k'}n_{k'}(g_{ik'k'k}-g_{ik'kk'})\delta_{n_k,1}\delta_{n_i,1} \tag{5}$$

$$\delta=\sum_{\min(i,k)+1}^{\max(i,k)-1}n_j \tag{6}$$

(5)式是著名的Slater-Condon规则[2-4]的单粒子跃迁矩阵元公式，是1930年E.U. Condon导出的[4]。[2],[3]中记号与[1]不同，本文采用[1]的记号，多了个$(-1)^{\delta}$因子。

## 二、计算二体算符全部非零矩阵元的一个简便方法

二体算符[1],[3]

$$\hat{G}=\frac{1}{2}\sum_{\alpha'\beta'\beta\alpha}g_{\alpha'\beta'\beta\alpha}a^{+}_{\alpha'}a^{+}_{\beta'}a_{\beta}a_{\alpha} \tag{7}$$

其中 $$g_{\alpha'\beta'\beta\alpha}=\int\varphi^*_{\alpha'}(q_1)\varphi^*_{\beta'}(q_2)g(q_1,q_2)\varphi_\beta(q_2)\varphi(q_1)dq_1dq_2$$

$a^+_\alpha$，$a_\alpha$为玻色子或费米子在$\alpha$态的产生，湮灭算符，由于一般有$g(q_1,q_2)=g(q_2,q_1)$，易得

$$g_{\alpha'\beta'\beta\alpha}=g_{\beta'\alpha'\alpha\beta} \tag{8}$$

(7) 式有四个下标$\alpha'\beta'\beta\alpha$，当这些下标中相等或不等时，计算公式是不同的。为了简化记号，约定：

不同下标暗含不等 (9)

按此约定，对玻色子，下标$\alpha'\beta'\beta\alpha$可分解为下列各种相等与不等的所有情况：

$$\begin{aligned}\alpha'\beta'\beta\alpha\Rightarrow&\alpha^4\\&+(\alpha\beta^2\alpha+\alpha\beta\alpha\beta)+\alpha^2\beta^2+(\beta\alpha^3+\alpha\beta\alpha^2+\beta^2\alpha\beta+\beta^3\alpha)\\&+\gamma^2\beta\alpha+(\gamma\beta\gamma\alpha+\gamma\beta\alpha\gamma+\beta\gamma^2\alpha+\beta\gamma\alpha\gamma)+\alpha\beta\gamma^2\\&+\alpha'\beta'\beta\alpha\end{aligned} \tag{10}$$

共15项。其中前 3 项给出对$\hat{G}$的平均值的贡献，即[1]中(14)式；第四项给出$(\beta,\beta)\to(\alpha,\alpha)$的贡献，即[1](17)式；最后一项给出$(\beta,\alpha)\to(\alpha'\beta')$的贡献，即[1](16)式。[1]中疏忽了第5项至第14项也能给出二体算符的非零矩阵元。其中第5,6项给出$(\alpha,\alpha)\to(\alpha,\beta)$的贡献，即(4)式第二项；第7,8项给出$(\alpha,\beta)\to(\beta^2)$的贡献，即(4)式第一项；第10至第13项给出$(\gamma,\alpha)\to(\beta,\gamma)$的贡献，第11、12项给出(4)中第三项，第10、13项给出(4)式中第四项；合起来(10)中第5-8，10-13共同给出二体算符单粒子跃迁$(\alpha\to\beta)$的贡献，其矩阵元为(4)式。第9项给出$(\beta\alpha)\to(\gamma^2)$的贡献，其矩阵元为(2)式；第14项给$(\gamma^2)\to(\beta\alpha)$的贡献，其矩阵元为(1)式。(1)、(2)、(4)式的推导十分简单，基本上可根据(10)的分解，利用(8)式直接写出结果，故从略。

对费米子，由于泡利原理，(7)式下标$\alpha'\beta'\beta\alpha$中$\alpha'\neq\beta'$，$\alpha\neq\beta$，应用约定(9) $\alpha'\beta'\beta\alpha$可分解为下列各种相等与不等的所有情况：

$$\begin{aligned}\alpha'\beta'\beta\alpha\Rightarrow&(\alpha\beta\beta\alpha+\alpha\beta\alpha\beta)\\&+(\gamma\beta\gamma\alpha+\gamma\beta\alpha\gamma+\beta\gamma^2\alpha+\beta\gamma\alpha\gamma)\\&+\alpha'\beta'\beta\alpha\end{aligned} \tag{11}$$

共7项，第1、2项给出对平均值的贡献，即[1]中(6)式；第7项给出$(\beta,\alpha)\to(\alpha',\beta)$的贡献，即[1]中(7)式。[1]中遗漏了第3-6项给出的$(\gamma\alpha)\to(\beta,\gamma)$单粒子跃迁的贡献，其矩阵元为(5)式，其中(11)中4,5项给(5)式中第一项，(11)中3,6项给出(5)式中第二项。利用分解(11)及(8)式，可以直接写出(5)式，故推导从略。

## 参 考 文 献

[1] 曾谨言，量子力学（下），科学出版社，1981.

[2] John c. Slater, Quantum Theory of Atomic Structure, Volume I, P294, 1960.

[3] John Avery, Creation and Annihilation Operators, P29, P33, 1976.

[4] E.U.Condon, phys. Rev., 36 1121 (1930),

# A Comment on Matrix Elements of Two-particle Operator

Chen Jianhua