国防科技大学学报
JOURNAL OF NATIONAL UNIVERSITY OF DEFENSE TECHNOLOGY
一九八五年第四期 总第五十二期 No.4 1985 Sum. 52

算符微商与对易式计算

陈 健 华

摘 要 本文引用算符微商概念，建立了算符微商与对易式的联系；对玻色子和费米子，均得到了计算对易式的简便而普遍的算符微商表达式。

一、引 言

波方程与基本对易关系构成量子力学的基本方程，正确地描述了微观客体的波粒二象性及运动规律。对易式计算在量子力学中多处出现，但由于乘法交换律对算符之积不适用，对易代数不能用，而对易式与分析运算的联系未见普遍使用（坐标表象中p_i表为$-i\hbar\partial/\partial x_i$普遍使用，对玻色子产生，湮灭算符的微商参见［5］），使得对易式计算大部从基本对易式或反对易式出发，计算冗长，相当不便。

本文目的是系统地建立分析运算与对易式之间的联系。为此，引入算符微商概念，在此基础上对玻色子和费米子分别建立对易式的算符微商表达式，并应用于各种情况给出具体公式，使对易式计算较为简便。

二、算 符 微 商

本文的算符运算包含算符的代数运算和算符对基本算符的微商运算。

1. 算符代数运算

算符的代数运算包含算符与算符或数之和，算符与数之积，算符与算符之积三种运算。除乘法交换律对算符与算符之积不适用外，算术运算律对算符的代数运算全部适用。

算符A和B的对易式定义为

$$[A,B]_-=AB-BA \tag{1}$$

当$[A,B]_-=0$，称A与B对易。

算符A和B的反对易式定义为

$$[A,B]_+=AB+BA \tag{2}$$

当$[A,B]_+=0$，称A与B反对易。

由定义式(1)、(2)知，对易式和反对易式具有线性性质：

$$[B,c_1A_1+c_2A_2]_\mp=c_1[B,A_1]_\mp+c_2[B,A_2]_\mp \tag{3}$$

这里及以下均用c或c_i表示小数，不另说明。

一九八四年十一月九日收到

2. 基本算符

在定义算符对基本算符的微商之前，需明确基本算符的含义。

基本算符有两个属性：一是彼此独立，即任一基本算符不能用其他基本算符通过代数运算构成；二是一切算符都能由基本算符通过代数运算构成。基本算符相当于普通函数中的独立变量。

基本算符分为两类：一类为基本玻色算符，其特征是基本算符间的对易式为 c 数；另一类为基本费米算符，其特征是基本算符间的反对易式为 c 数。

本文讨论的基本算符有：

a．正则坐标x_i与正则共轭动量p_i，满足对易式：

$$[x_i,p_j]_-=i\hbar\delta_{ij},\ [x_i,x_j]_-=[p_i,p_j]_-=0 \tag{4a}$$

b．玻色及费米产生算符a_i^+与湮灭算符a_i，分别满足对易式及反对易式

$$[a_i,a_j^+]_\mp=\delta_{ij},\ [a_i,a_j]_\mp=[a_i^+,a_j^+]_\mp=0 \tag{4b}$$

a_i^+与a_i互为厄米共轭。

c．坐标表象玻色及费米产生算符$\psi^+(\vec r)$与湮灭算符 $\psi(\vec r)$，分别满足对易式及反对易式：

$$[\psi(\vec r),\psi^+(\vec r')]_\mp=\delta(\vec r-\vec r'),[\psi(\vec r),\psi(\vec r')]_\mp=[\psi^+(\vec r),\psi^+(\vec r')]_\mp=0 \tag{4c}$$

$\psi(\vec r)$与$\psi^+(\vec r)$互为厄米共轭。

d．玻色及费米場算符$u_i(\vec r)$及其正则共轭$\pi_i(\vec r)$，分别满足对易式及反对易式：

$$\left.\begin{aligned}&[u_i(\vec r),\ \pi_j(\vec r')]_\mp=i\hbar\delta_{ij}\delta(\vec r-\vec r')\\&[u_i(\vec r),u_j(\vec r)]_\mp=[\pi_i(\vec r),\pi_j(\vec r')]_\mp=0\end{aligned}\right. \tag{4d}$$

(4a)～(4d)包含了从量子力学[1],[3]到量子場论[2]中的全部基本算符，它们不仅满足基本算符的两个属性和玻色、费米两类基本算符的特征，而且每一玻色（费米）基本算符仅与其共轭（正则共轭或厄米共轭）算符的对易式（反对易式）不为 0 。

将基本算符统一编号，（例如 a_i 编奇数号$(2i-1)$，a_i^+编偶数号$2i$）并约定 b_i 表示基本玻色算符，a_i表示基本费米算符，b_i，a_i的共轭算符记为b_{i^*}，a_{i^*}，则上述（4a)—（4d）式可表为

$$[b_i,b_j]_-=[b_i,b_{i^*}]_-\delta_{j,i^*} \tag{5}$$

$$[a_i,a_j]_+=[a_i,a_{i^*}]_+\delta_{j,i^*} \tag{6}$$

基本玻色算符b_i与基本费米算符a_j对易

$$[a_i,b_j]_-=0 \tag{7}$$

任意玻色算符由b_i（通过代数运算）构成，任意费米算符由a_i构成，任意（混合）算符由b，a_j构成，并分别记为$A(a)$，$B(b)$，$F(a,b)$。

3. 算符微商的定义

算符微商均指算符对基本算符的微商。

算符对基本玻色算符b_i的微商定义为[2]：

1°
$$\frac{\partial[c_1F_1(a,b)+c_2F_2(a,b)]}{\partial b_i}=c_1\frac{\partial F_1(a,b)}{\partial b_i}+c_2\frac{\partial F_2(a,b)}{\partial b_i} \tag{8a}$$

2° $$\frac{\partial[cA(a)]}{\partial b_i}=0 \tag{8b}$$

3° $$\frac{\partial(cA(a)b_{j_1}b_{j_2}\cdots b_{j_n})}{\partial b_i}=cA(a)\sum_{k=1}^{n}\delta_{i,j_k}b_{j_1}\cdots b_{j_{k-1}}b_{j_{k+1}}\cdots b_{j_n} \tag{8c}$$

1°表示对算符多项式的算符微商为逐项微商之和，微商运算为线性运算；2°表示任意费米算符、c 数对基本玻色算符的微商为 0；3°与普通微商概念一致，仅需注意保持算符的原顺序。

算符对基本费米算符a_i的微商定义为[2]：

1° $$\frac{\partial[c_1F_1(a,b)+c_2F_2(a,b)]}{\partial a_i}=c_1\frac{\partial F_1(a,b)}{\partial a_i}+c_2\frac{\partial F_2(a,b)}{\partial a_i} \tag{9a}$$

2° $$\frac{\partial(cB(b))}{\partial a_i}=0 \tag{9b}$$

3° $$\frac{\partial(cB(b)a_{j_1}\cdots a_{j_n})}{\partial a_i}=cB(b)\sum_{k=1}^{n}(-1)^{n-k}\delta_{i,j_k}\,a_{j_1}\cdots a_{j_{k-1}}a_{j_{k+1}}\cdots a_{j_n} \tag{9c}$$

(9c)右端除需保持算符的原顺序外，每项要加上适当的符号，符号由a_{j_k}后基本费米算符的个数$(n-k)$决定——“偶正奇负”。这个符号规则使费米微商(9c)既与普通微商概念一致，又与基本费米算符服从的反对易关系(6)式一致。例如：

$\frac{\partial a_j}{\partial a_i}=\delta_{ij}$与普通微商概念一致；

$\frac{\partial(a_ja_k+a_ka_j)}{\partial a_i}=-\delta_{ij}a_k+a_j\delta_{ik}-\delta_{ik}a_j+a_k\delta_{ij}=0$与反对易关系$a_ja_k+a_ka_j=[a_j,a_k]_+=c$数一致。

三、玻色算符对易式的算符微商表达式

1. 基本玻色算符与任意算符对易式的算符微商表达式(定理1)

引理 1 对任意算符F，F_i有

$$[F,F_1F_2\cdots F_n]_-=\sum_{k=1}^{n}F_1\cdots F_{k-1}[F,F_k]_-F_{k+1}\cdots F_n \tag{10}$$

证：$n=1$，(10)式显然成立。

设$n=k$，(10)式成立，则对$n=k+1$，有

$$\begin{aligned}[F,F_1\cdots F_kF_{k+1}]_-&=[F,F_1\cdots F_k]_-F_{k+1}+F_1\cdots F_k[F,F_{k+1}]_-\\&=\sum_{i=1}^{k}F_1\cdots F_{i-1}[F,F_i]_-F_{i+1}\cdots F_{k+1}+F_1\cdots F_k[F,F_{k+1}]_-\\&=\sum_{i=1}^{k+1}F_1\cdots F_{i-1}[F,F_i]_-F_{i+1}\cdots F_{k+1}\end{aligned}$$

故$n=k+1$成立。证毕。

由(10)，(7)，(3)，易见：任意玻色算符$B(b)$与任意费米算符$A(a)$对易，

$$[B(b), A(a)]_- = 0 \tag{11}$$

定理 1 基本玻色算符b_j与任意算符$F(a,b)$的对易式的算符微商来达式为

$$[b_j, F(a,b)]_- = [b_j, b_{j^*}]_- \frac{\partial F(a,b)}{\partial b_{j^*}} \tag{12}$$

证： 1°由于(12)式左端对易式与右端玻色微商具有相同的线性性质(3)，(8a)，故只需证明(12)式对任意单项式成立即可。

2° 对任意单项式 $F = cA(a)b_{j_1}\cdots b_{j_n}$ 有

$$[b_j, cA(a)b_{j_1}\cdots b_{j_n}]_- = cA(a)[b_j, b_{j_1}\cdots b_{j_n}]_- \tag{11}$$

$$= cA(a)\sum_{k=1}^{n} b_{j_1}\cdots b_{j_{k-1}}[b_j, b_{j_k}]b_{j_{k+1}}\cdots b_{j_n} \tag{10}$$

$$= cA(a)\sum_{k=1}^{n}[b_j, b_{j^*}]\delta_{j_k, j^*}b_{j_1}\cdots b_{j_{k-1}}b_{j_{k+1}}b_{j_n} \tag{6}$$

$$= [b_j, b_{j^*}]\frac{\partial(cA(a)b_{j_1}\cdots b_{j_n})}{\partial b_{j^*}} \tag{8c}$$

故对单项(12)式成立。

由1°，2°，(12)式对任意算符多项式$F(a,b)$成立。

2. 定理 1 的应用

(12)式用于正则变量x_i和p_i(4a)，得

$$[x_i, F(x,p)]_- = [x_i, p_i]_- \frac{\partial F(x,p)}{\partial p_i} = i\hbar\frac{\partial F(x,p)}{\partial p_i} \tag{13a}$$

$$[p_i, F(x,p)]_- = [p_i, x_i]_- \frac{\partial F(x,p)}{\partial x_i} = -i\hbar\frac{\partial F(x,p)}{\partial x_i} \tag{13b}$$

(13a)，(13b)是量子力学中常用的公式。

(12)式用于玻色产生，湮灭算符b_i^+、b_i(4b)，得

$$[b_i, F(b,b^+)]_- = \frac{\partial F(b,b^+)}{\partial b_i^+} \tag{13c}$$

$$[b_i^+, F(b,b^+)]_- = -\frac{\partial F(b,b^+)}{\partial b_i} \tag{13d}$$

(13c)和(13d)见文献[5](3.3.9a)和(3.3.9b)式。

(12)式用于坐标表象产生和湮灭算符$\psi^+(\vec{r})$和$\psi(\vec{r})$，得$\psi(\vec{r})$，$\psi^+(\vec{r})$与单体算符[1]

$$F = \int \psi^+(\vec{r})f(\vec{r}, -i\hbar\nabla)\psi(\vec{r})d^3\vec{r} \tag{14a}$$

二体算符[1]

$$G = \int \psi^+(\vec{r})\psi^+(\vec{r}')g(\vec{r},\vec{r}')\psi(\vec{r}')\psi(\vec{r})d^3\vec{r}d^3\vec{r}' \tag{14b}$$

的对易式为

$$[\psi(\vec{r}), F]_- = \int d^3\vec{r}'[\psi(\vec{r}), \psi^+(\vec{r}')]_- \frac{\partial[\psi^+(\vec{r}')f\psi(\vec{r}')]}{\partial\psi(\vec{r}')^+}$$

$$= f(\vec{r}, -i\hbar\nabla)\psi(\vec{r}) = \frac{\delta F}{\delta\psi^+(r)} \tag{15a}$$

$$[\psi(\vec{r}),G]_-=\int d^3\vec{r}'\psi^+(\vec{r}')[g(\vec{r},\vec{r}')+g(\vec{r}',\vec{r})]\psi(\vec{r}')\psi(\vec{r})$$

$$=\frac{\delta G}{\delta\psi(\vec{r})^+} \tag{15b}$$

$$[\psi^+(\vec{r}'),F]_-=-\frac{\delta F}{\delta\psi(\vec{r})} \tag{15c}$$

$$[\psi^+(\vec{r}),G]_-=-\frac{\delta G}{\delta\psi(\vec{r})} \tag{15d}$$

即$\psi(r)$，$\psi^+(r)$与单体，二体算符的对易式可表为对共轭算符的泛函微商。这里是算符泛函的泛函微商，除沿用玻色微商定义(8)外，与普通泛函微商[4]相同。

(12)式用于玻色正则場算符$u_i(\vec{r})$和$\pi_i(\vec{r})$，得正则場算符与力学量[2]

$$F=\int d^3\vec{r}f(u,\nabla u,\pi,\nabla\pi)$$

的对易式，与(15a)—(15d)类似：

$$[u_i(\vec{r}),F]_-=i\hbar\left[\frac{\partial f}{\partial\pi_i(\vec{r})}-\nabla\cdot\frac{\partial f}{\partial\nabla\pi_i(\vec{r})}\right]=i\hbar\frac{\delta F}{\delta\pi_i(\vec{r})} \tag{15e}$$

$$[\pi_i(\vec{r}),F]_-=-i\hbar\left(\frac{\partial f}{\partial u_i(\vec{r})}-\nabla\cdot\frac{\partial f}{\partial\nabla u_i(\vec{r})}\right)=-i\hbar\frac{\partial F}{\delta u_i(\vec{r})} \tag{15f}$$

(15e)和(15f)式见[2](14.37)式。

3. 定理1的推广

定理1（(12)式）与引理1(10)结合，可得任意个基本玻色算符之积与任意算符的对易式的算符微商表达式：

$$[b_{j_1}\cdots b_{j_n},F(a,b)]_-=\sum_{k=1}^{n}[b_{j_k},b_{j_k}^*]_-b_{j_1}\cdots b_{j_{k-1}}\frac{\partial F(a,b)}{\partial b_{j_k}^*}b_{j_{k+1}}\cdots b_{j_n} \tag{16}$$

玻色算符多项式与$F(a,b)$的对易式可用(16)式逐项计算。作为(16)式的应用，我们计算粒子数算符$N=\sum_i b_i^+b_i$与简化二体算符$b_j^+b_h^+b_lb_m$的对易式：

$$\begin{aligned}\sum_i[b_i^+b_i,b_j^+b_h^+b_lb_m]&=\sum_i\Big\{[b_i^+,b_i]\frac{\partial(b_j^+b_h^+b_lb_m)}{\partial b_i}b_i\\&\quad+[b_i,b_i^+]b_i^+\frac{\partial(b_j^+b_h^+b_lb_m)}{\partial b_i^+}\Big\}\\&=\sum_i\{-b_i^+b_h^+(\delta_{il}b_m+b_l\delta_{im})b_i+b_i^+(\delta_{ij}b_h^++b_i^+\delta_{ih})b_lb_m\}\\&=0\end{aligned}$$

四、费米算符对易式的算符微商表达式

1. 引理2

对任意算符F，F_i有

$$[F,F_1F_2\cdots F_{2n}]_-=\sum_{k=1}^{2n}(-1)^{k-1}F_1\cdots F_{k-1}[F,F_k]_+F_{k+1}\cdots F_{2n} \tag{17a}$$

$$[F,F_1F_2\cdots F_{2n+1}]_+=\sum_{k=1}^{2n+1}(-1)^{k-1}F_1\cdots F_{k-1}[F,F_k]_+F_{k+1}\cdots F_{2n+1} \quad (17b)$$

证： 1°先证(17a)式：

$n=1$，有

$$[F,F_1F_2]_-=FF_1F_2-F_1F_2F=(FF_1+F_1F)F_2-F_1(FF_2+F_2F)$$
$$=[F,F_1]_+F_2-F_1[F,F_2]_+$$

故$n=1$时(17a)成立。

设$n=k$时(17a)成立，则$n=k+1$有

$$[F,F_1\cdots F_{2k+2}]_-=[F,F_1\cdots F_{2k}]_-F_{2k+1}F_{2k+2}+F_1\cdots F_{2k}[F,F_{2k+1}F_{2k+2}]_-$$
$$=\sum_{i=1}^{2k}(-1)^{i-1}F_1\cdots F_{i-1}[F,F_i]_+F_{i+1}\cdots F_{2k+2}+F_1\cdots F_{2k}\{[F,F_{2k+1}]_+F_{2k}$$
$$-F_{2k+1}[F,F_{2k+2}]_+\}$$
$$=\sum_{i=1}^{2k+2}(-1)^{i-1}F_1\cdots F_{i-1}[F,F_i]_+F_{i+1}\cdots F_{2k+2}$$

故$n=k+1$成立。

于是，(17a)对$n=1,2,\cdots$成立。

2°　再证(17b)式：

$n=0$，(17b)显然成立。

设$n=k$时(17b)成立，则$n=k+1$有

$$[F,F_1\cdots F_{2k+3}]_+=FF_1\cdots F_{2k+3}+F_1\cdots F_{2k+3}F$$
$$=[F,F_1\cdots F_{2k+1}]_+F_{2k+2}F_{2k+3}-F_1\cdots F_{2k+1}[F,F_{2k+2}F_{2k+3}]_-$$
$$=\sum_{i=1}^{2k+1}(-1)^{i-1}F_1\cdots F_{i-1}[F,F_i]_+F_{i+1}\cdots F_{2k+3}-F_1\cdots F_{2k+1}\{[F,$$
$$F_{2k+2}]_+F_{2k+3}-F_{2k+2}[F,F_{2k+3}]_+\}$$
$$=\sum_{i=1}^{2k+3}(-1)^{i-1}F_1\cdots F_{i-1}[F,F_i]_+F_{i+1}\cdots F_{2k+3},\qquad \text{即}n=k+1\text{成立。}$$

故(17b)式成立。引理二证毕。

2．基本费米算符与费米偶算符的对易式及与费米奇算符的反对易式的算符微商表达式（定理2）

若算符的每项均含有偶数个基本费米算符，定义为费米偶算符，记为$F_+(a,b)$；若算符的每项均含有奇数个基本费米算符，定义为费米奇算符。自然界的一切相互作用，都是费米偶算符[2]。费米奇算符不代表可观测量，但奇数个费米子态可由费米奇算符作用于真空态得到。

基本费米算符与费米偶算符的对易式的算符微商表达式，及基本费米算符与费米奇算符的反对易式的算符微商表达式由定理2给出。

定理 2　$$[a_j,F_\pm(a,b)]_\mp=\mp[a_j,a_{j*}]_+\frac{\partial F_\pm(a,b)}{\partial a_{j*}} \quad (18)$$

证： 1°由于(18)式左端对易式，反对易式与右端费米算符微商对“和”与“数积”有相同的代数性质(3)(9c)，故只需证明(18)式对任意单项成立。

2°　对单项费米偶算符$cB(b)a_{j_1}\cdots a_{j_{2\eta}}$，有

$$[a_j, cB(b)a_{j_1}\cdots a_{j_{2n}}]_- = cB(b)[a_j, a_{j_1}\cdots a_{j_{2n}}] \tag{11}$$

$$= cB(b)\sum_{k=1}^{2n}(-1)^{k-1}a_{j_1}\cdots a_{j_{k-1}}[a_j, a_{j_k}]_+ a_{j_{k+1}}\cdots a_{j_{2n}} \tag{17a}$$

$$= cB(b)\sum_{k=1}^{2n}(-1)^{k-1}[a_j, a_{j^*}]_+ \delta_{j_k, j^*} a_{j_1}\cdots a_{j_{k-1}}a_{j_{k+1}}\cdots a_{j_{2n}} \tag{6}$$

$$= -[a_j, a_{j^*}]_+ \frac{\partial(cB(b)a_{j_1}\cdots a_{j_{2n}})}{\partial a_{j^*}} \tag{9c}$$

故(18)式对费米偶算符（上行）成立。

3° 对单项费米奇算符，利用(11)，(17b)，(6)，(9c)同样可得

$$[a_{j_1} cB(b)a_{j_1}\cdots a_{j_{2n+1}}]_+ = [a_j, a_{j^*}]_+ \frac{\partial(cB(a)a_{j_1}\cdots a_{j_{2n+1}})}{\partial a_{j^*}}$$

故(18)式对费米奇算符（下行）亦成立。定理2证毕。

3. 定理2的应用

(18)式用于费米子产生，湮灭算符a_i^+、a_i(4b)得

$$[F_\pm(a, a^+), a_j]_\mp = \frac{\partial F_\pm(a, a^+)}{\partial a_j^*} \tag{19a}$$

$$[F_\pm(a, a^+), a_i^+]_\mp = \frac{\partial F_\pm(a, a^+)}{\partial a_j} \tag{19b}$$

(18)式用于坐标表象费米子产生，湮灭算符$\psi^+(\vec r)$、$\psi(\vec r)$(4c)，对费米偶（奇）算符多项式

$$f_\pm = f_\pm(\psi^+(\vec r_1), \psi^+(\vec r_2), \cdots; \psi(\vec r_1), \psi(\vec r_2), \cdots)$$

分别有

$$[f_\pm, \psi(\vec r)]_\mp = \sum_i \delta(\vec r - \vec r_i)\frac{\partial f_\pm}{\partial \psi^+(\vec r_i)} \tag{19c}$$

$$[f_\pm, \psi^+(\vec r)]_\mp = \sum_i \delta(\vec r - \vec r_i)\frac{\partial f_\pm}{\partial \psi(\vec r_i)} \tag{19d}$$

单体算符F(14a)，二体算符G(14b)，均为费米偶算符，故F、G与$\psi(\vec r)$、$\psi^+(\vec r)$的对易式分别为

$$[F, \psi(\vec r)]_- = \int d^3\vec r'[\psi^+(\vec r')f\psi(\vec r'), \psi(\vec r)]_-$$

$$= \int d^3\vec r'\delta(\vec r - \vec r')\frac{\partial[\psi^+(\vec r')f\psi(\vec r')]}{\partial\psi^+(\vec r')}$$

$$= -f\psi(\vec r) = \frac{\delta F}{\delta\psi^+(\vec r)} \tag{19e}$$

$$[F, \psi^+(\vec r)]_- = \psi^+(\vec r)f = \frac{\delta F}{\delta\psi(\vec r)} \tag{19f}$$

$$[G, \psi(\vec r)]_- = -\int d^3\vec r'\psi^+(\vec r')(g(\vec r, \vec r') + g(\vec r', \vec r)\psi(\vec r')\psi(\vec r) = \frac{\delta G}{\delta\psi^+(\vec r)} \tag{19g}$$

$$[G,\psi^{+}(\vec{r})]_{-}=\psi^{+}(r)\int\psi^{+}(\vec{r}')(g(\vec{r},\vec{r}')+g(\vec{r}',\vec{r}))\psi(\vec{r}')d^{3}\vec{r}'=\frac{\delta G}{\delta\psi(\vec{r})}\quad(19h)$$

这里算符泛函微商，除沿用费米微商定义(9)外，与普通泛函微商[4]相同。(19e)—(19h)可表述为：单体、二体算符与$\psi(\vec{r})(\psi^{+}(\vec{r}))$的对易式，等于该算符对$\psi^{+}(\vec{r})(\psi(\vec{r}))$的泛函微商。

(18)式用于费米正则場算符$u_i(\vec{r})$，$\pi_i(\vec{r})$(4d)，对费米偶算符和费米奇算符空间密度[2]

$$f_{\pm}=f_{\pm}(u,\nabla u,\pi,\nabla\pi)$$

有

$$[f_{\pm},u_i(\vec{r}')]_{\mp}=i\hbar\left[\frac{\partial f_{\pm}}{\partial\pi_i(\vec{r})}\delta(\vec{r}-\vec{r}')+\frac{\partial f_{\pm}}{\partial\nabla\pi_i(\vec{r})}\cdot\nabla\delta(\vec{r}-\vec{r}')\right]\quad(19i)$$

$$[f_{\pm},\pi_i(\vec{r}')]_{\mp}=i\hbar\left[\frac{\partial f_{\pm}}{\partial u_i(\vec{r})}\delta(\vec{r}-\vec{r}')+\frac{\partial f_{\pm}}{\partial\nabla u_i(\vec{r})}\cdot\nabla\delta(\vec{r}-\vec{r}')\right]\quad(19j)$$

$f_{\pm}$对空间的积分

$$F_{\pm}=\int f_{\pm}d^{3}\vec{r}\quad(20)$$

与正则場算符的对易式为

$$[F_{\pm},u_i(\vec{r})]_{\mp}=i\hbar\left[\frac{\partial f_{\pm}}{\partial\pi_i(\vec{r})}-\nabla\cdot\frac{\partial f_{\pm}}{\partial\nabla\pi_i(\vec{r})}\right]=i\hbar\frac{\delta F_{+}}{\delta\pi_i(\vec{r})}\quad(19k)$$

$$[F_{\pm},\pi_i(\vec{r})]=i\hbar\left[\frac{\partial f_{+}}{\partial u_i(\vec{r})}-\nabla\cdot\frac{\partial f_{+}}{\partial\nabla u_i(\vec{r})}\right]=i\hbar\frac{\delta F_{+}}{\delta u_i(\vec{r})}\quad(19l)$$

前已指出，自然界存在的相互作用总是费米偶算符，由(19k)，(19l)易得费米場算符的正则运动方程[2]。

4. 定理2的推广

定理2与引理1结合得

$$[F_{+}(a,b),a_{j_1}\cdots a_{j_n}]_{-}=\sum_{k=1}^{n}[a_{j_k^*},a_{j_k}]_{+}a_{j_1}\cdots a_{j_{k-1}}\frac{\partial F_{+}(a,b)}{\partial a_{j_k^*}}a_{j_{k+1}}\cdots a_{j_n}\quad(21)$$

(21)可用于计算费米偶算符与任意个基本费米算符之积的对易式。

定理2与引理2结合，得：

$$[F_{-}(a,b),a_{j_1}\cdots a_{j_{2n}}]_{-}=\sum_{k=1}^{2n}(-1)^{k-1}[a_{j_k^*},a_{j_k}]_{+}a_{j_1}\cdots a_{j_{k-1}}\frac{\partial F_{-}(a,b)}{\partial a_{j_k^*}}a_{j_{k+1}}\cdots a_{j_{2n}}\quad(22a)$$

$$[F_{-}(a,b),a_{j_1}\cdots a_{j_{2n+1}}]_{+}=\sum_{k=1}^{2n+1}(-1)^{k-1}[a_{j_k^*},a_{j_k}]_{+}a_{j_1}\cdots a_{j_{k-1}}\frac{\partial F_{-}(a,b)}{\partial a_{j_k^*}}a_{j_{k+1}}\cdots a_{j_{2n}}\quad(22b)$$

(22a)可用于计算费米奇算符与偶数个基本费米算符之积的对易式；(22b)可用于计算费米奇算符与奇数个基本费米算符之积的反对易式。

作为示例，计算单体算符

$$F=\sum_{ij}f_{ij}a_i^\dagger a_j$$

与$F\ (a,b)$的对易式：

利用(21)，$[F_+,\sum_{ij}f_{ij}a_i^\dagger a_j]_-=\sum_{ij}f_{ij}\left\{[a_i,a_i^\dagger]_+\frac{\partial F_+}{\partial a_i}a_j+[a_j^\dagger,a_j]_+a_i^\dagger\frac{\partial F_+}{\partial a_j^\dagger}\right\}$

$$=\sum_{ij}f_{ij}\left(\frac{\partial F_+}{\partial a_i}a_j+a_i^\dagger\frac{\partial F_+}{\partial a_j^\dagger}\right)$$

利用(22a)，$[F_-,\sum_{ij}f_{ij}a_i^\dagger a_j]_-$

$$=\sum_{ij}f_{ij}\left\{[a_ia_i^\dagger]_+\frac{\partial F_-}{\partial a_i}a_j--[a_j^\dagger,a_j]_+a_i^\dagger\frac{\partial F_-}{\partial a_j^\dagger}\right\}$$

$$=\sum_{ij}f_{ij}\left\{\frac{\partial F_-}{\partial a_i}a_j-a_i^\dagger\frac{\partial F_-}{\partial a_j^\dagger}\right\}$$

五、基本算符的微商表达

量子力学中，正则动量p_i在坐标x_i表象用$-i\hbar\partial/\partial x_i$表达，坐标$x_i$在动量动$p_i$表象用$i\hbar\partial/\partial p_i$表达，使用十分方便。对(4a)～(4d)所列基本算符，亦可用其共轭算符的微商来表达。

1. 玻色基本算符的微商表达

首先考察玻色微商算符$\partial/\partial b_i$的代数性质，由(8a)可见$\partial/\partial b_i$为线性算符；由(8c)易见

$$\frac{\partial(b_{j_1}b_{j_2}\cdots b_{j_n}b_{i_1}\cdots b_{i_n})}{\partial b_j}=\frac{\partial(b_{j_1}\cdots b_{j_n})}{\partial b_j}b_{i_1}\cdots b_{i_m}+b_{j_1}\cdots b_{j_n}\frac{\partial(b_{i_1}\cdots b_{i_m})}{\partial b_j}$$

结合(8a)，得算符与算符之积的玻色微商规则

$$\frac{\partial[F_1(a,b)F_2(a,b)]}{\partial b_j}=\frac{\partial F_1(a,b)}{\partial b_j}F_2(a,b)+F_1(a,b)\frac{\partial F_2(a,b)}{\partial b_j}\tag{23}$$

它与普通函数的微商规则相同。考虑到$F_2(a,b)$为任意算符，(23)改写为

$$\partial/\partial b_jF_1(a,b)=\frac{\partial F_1(a,b)}{\partial b_j}+F_1(a,\ b)\,\partial/\partial b_j$$

即
$$[\partial/\partial b_j,\ F_1(a,b)]_-=\frac{\partial F_1(a,b)}{\partial b_j}\tag{24}$$

(24)式与(12)式结构完全相同。若用$[b_j,b_j\cdot]_-\partial/\partial b_j\cdot$代替(12)式左端$b_j$，则(12)式与(24)式合二而一。所以，对于对易式计算，b_j与$[b_j,b_j\cdot]_-\partial/\partial b_j\cdot$等价，故有

定理 3 $b_j=[b_j,\ b_{j*}]_-\partial/\partial b_{j*}$ (26)

由(26)即可直接写出基本玻色算符的微商表示：

$$x_i=i\hbar\partial/\partial p_i,\quad p_i=-i\hbar\partial/\partial x_i\tag{27a}$$

$$b_i=\partial/\partial b_i^\dagger,\qquad \partial_i^\dagger=-\partial/\partial b_i\tag{27b}$$

$$\psi(\vec{r})=\delta(\vec{r}-\vec{r}')\partial/\partial\psi^{+}(\vec{r}')=\frac{\delta}{\delta\psi^{+}(\vec{r})} \tag{27c}$$

$$\psi^{+}(\vec{r})=-\delta(\vec{r}-\vec{r}')\partial/\partial\psi(\vec{r})=-\frac{\delta}{\delta\psi(\vec{r})}$$

$$u_i(\vec{r})=i\hbar\frac{\delta}{\delta\pi_i(\vec{r})},\quad \pi_i(\vec{r})=-i\hbar\frac{\delta}{\delta u_i(\vec{r})} \tag{27d}$$

(26)式与(12)式，(27a)～(27d)与(13a)～(13d)，(15a)～(15f)等价。

2. 费米基本算符的微商表达

首先考察费米微商算符的代数性质，由(9a)可见$\partial/\partial a_i$为线性算符；令A_m，A_n分别表示m个、n个基本费米算符之积，由(9c)易见

$$\frac{\partial(A_m A_n)}{\partial a_i}=(-1)^n\frac{\partial A_m}{\partial a_i}A_n+A_m\frac{\partial A_n}{\partial a_i} \tag{28a}$$

又由定理2(18)式易见

$$a_i A_m A_n=(-1)^{m-1}[a_i,a_i^*]_+\frac{\partial A_m}{\partial a_i^*}A_n+(-1)^m A_m a_i A_n \tag{29a}$$

(28)式与(29)式表面上代数结构不同，为看出它们的共同点，对费米微商定义中(9c)作如下修改：

$$\frac{\partial^*(a_{j_1}\cdots a_{j_m})}{\partial a_i}=\sum_{k=1}^{m}(-1)^{k-1}\delta_{i,j_k}a_{j_1}\cdots a_{j_{k-1}}a_{j_{k+1}}\cdots a_{j_m} \tag{30}$$

右端各项符号由a_{j_k}前基本费米算符的个数$(k-1)$决定——偶正奇负。新定义(30)与旧定义(9c)的关系是左微商与右微商的关系，即

$$\partial^*/\partial a_i=(-1)^{m-1}\partial/\partial a_i \tag{31}$$

m是被微商的算符所含基本费米算符的个数。新定义同样与基本费米算符服从的反对易关系一致，且$\partial^* a_j/\partial a_i=\delta_{ij}$，与普通微商概念协调。按新定义(30)，(28)和(29)式可改写为

$$\frac{\partial^*(A_m A_n)}{\partial a_i}=\frac{\partial^* A_m}{\partial a_i}A_n+(-1)^m A_m\frac{\partial^* A_n}{\partial a_i} \tag{28b}$$

$$a_i A_m A_n=[a_i,a_i^*]_+\frac{\partial^* A_m}{\partial a_{i^*}}A_n+(-1)^m A_m a_i A_n \tag{29b}$$

可见(28b)与(29b)两式代数结构完全相同。(29)b中若用$[a_i,a_{i^*}]_+\partial^*/\partial a_{i^*}$代替$a_i$，消去非零$c$数$[a_i,a_{i^*}]_+$，则得(28b)。对于对易式计算，$a_i$与$[a_i,a_{i^*}]_+\partial^*/\partial a_{i^*}$等价，取两者相等，可以保证所有公式协调一致。故有

定理 4 $a_i=[a_i,a_{i^*}]_+\partial^*/\partial a_{i^*}$ (32)

(32)代入(29b)，则(29b)与(28b)完全相同。可见定理4与定理2完全等价。

(32)式用于基本费米算符，得

$$a_i=\partial^*/\partial a_i^{+},\quad a_i^{+}=\partial^*/\partial a_i \tag{33}$$

$$\psi(\vec{r})=\delta(\vec{r}-\vec{r}')\partial^{*}/\partial\psi^{+}(\vec{r}')=\delta^{*}/\partial\psi^{+}(r)$$
$$\psi^{+}(\vec{r})=\delta(\vec{r}-\vec{r}')\partial^{*}/\partial\psi(\vec{r}')=\delta^{*}/\delta\psi(\vec{r})$$
$$u_i(\vec{r})=i\hbar\delta(\vec{r}-\vec{r}')\partial^{*}/\partial\pi_i(\vec{r}')=i\hbar\delta^{*}/\delta\pi_i(\vec{r})$$
$$\pi_i(\vec{r})=i\hbar\delta(\vec{r}-\vec{r}')\partial^{*}/\partial u_i(\vec{r}')=i\hbar\delta^{*}/\delta u_i(\vec{r})$$

有了基本费米算符的共轭微商表达式(33)，及费米微商的定义(9a)、(9b)、(30)，第三节的全部结果可以自然地得到。

朱代谟副教授精心审阅了本文的全部公式并提出了宝贵的建议，在此表示衷心的谢意。

参 考 文 献

[1] 曾谨言，量子力学，科学出版社，1981.

[2] S.N古普塔，量子电动力学，北师大出版社，1981.

[3] L.I.席夫，量子力学，人民教育出版社，1982.

[4] 郭敦仁，数学物理方法，人民教育出版社，1978.

[5] W.H.路易塞尔，辐射的量子统计性质，科学出版社，1982.

The Formulas of the Dperator Derivatives for Commutators

Chen Jianhua

Abstract

With definitions of the operator derivatives a relationship between the commutators and the operator derivatives have be established. we have found both simple and common expresions of the operator derivatives for Boson and Fermion.