量子场论 - 4
正则量子化

Notes from E. Fradkin (2021)

现在开始讨论我们感兴趣的主要话题：量子力学涨落在无限多自由度系统中的作用。首先简要介绍单粒子量子力学。

1 初等量子力学

初等量子力学描述了具有有限自由度的系统的量子动力学。经典系统量子化的标准程序涉及两个公理。令 $L(q,\dot{q})$ 为广义坐标 q 所描述的抽象动力学系统的 Lagrangian。回顾经典力学的正则形式是基于动力学变量正则对的概念。因此，与正则坐标 q 成对的是正则动量 p：

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \tag{1}$$

在正则形式中，系统的动力学受经典 Hamiltonian 支配

$$H(q,p) = p\dot{q} - L(q,\dot{q}) \tag{2}$$

即 Lagrangian 的 Legendre 变换。在正则 (Hamiltonian) 形式中，运动方程就是 Hamilton 方程：

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \; \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \tag{3}$$

系统的动力学状态由任意给定时间 t 的正则坐标和正则动量的值定义。由于该定义，坐标和动量满足一组 Poisson 括号关系，

$$\{q,p\}_{PB} = 1 \qquad \{q,q\}_{PB} = \{p,p\}_{PB} = 0 \tag{4}$$

其中

$$\{A,B\}_{PB} \equiv \frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial B}{\partial q} \tag{5}$$

在量子力学中，原始（或基本）概念是物理状态的概念。系统的物理状态由一个抽象矢量空间中的状态矢量表示，这个空间被称为量子态的 Hilbert 空间 $\mathcal{H}$。空间 $\mathcal{H}$ 是一个矢量空间，因为如果两个矢量 $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ 和 $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}$ 代表物理状态，那么线性叠加 $|a\Psi + b\Phi\rangle = a|\Psi\rangle + b|\Phi\rangle$ 也代表一个物理状态，其中 a 和 b 是两个任意复数，因此它是 Hilbert 空间的一个元素（即 $|a\Psi + b\Phi\rangle \in \mathcal{H}$）。叠加原理是量子力学的一条公理。

在量子力学中，动力学变量（即正则坐标 $\hat{q}$ 和相关正则动量 $\hat{p}$）、Hamiltonian H 等都由线性作用在态的 Hilbert 空间上的算符表示。因此，量子力学是一个线性理论，尽管物理观测量服从非线性的 Heisenber 运动方程。用 $\hat{A}$ 表示作用于 Hilbert 空间的任意算符。用算符 $\hat{A}$ 作用于态 $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ 的结果是另一个态 $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}$：

$$\hat{A}|\Psi\rangle = |\Phi\rangle \tag{6}$$

Hilbert 空间 $\mathcal{H}$ 具有内积。内积是将复数 $\langle\Phi|\Psi\rangle$ 赋值给给定的一对态 $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}$ 和 $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ 的操作。

由于 $\mathcal{H}$ 是个矢量空间，因此存在一组线性独立的态 $(|\lambda\rangle)$，称为基，张成整个 Hilbert 空间。因此，一个任意的态 $|\Psi\rangle$ 可以展开为构成 $\mathcal{H}$ 的基的一组完备态的的线性组合，

$$|\Psi\rangle = \sum_{\lambda} \Psi_{\lambda} |\lambda\rangle \tag{7}$$

这对于一组固定的基来说是唯一的。可以选取基使其内积正交：

$$\langle\lambda|\mu\rangle = \delta_{\lambda\mu} \tag{8}$$

一般来说，如果 $|\Psi\rangle$ 和 $|\Phi\rangle$ 是归一化态，

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \langle\Phi|\Phi\rangle = 1 \tag{9}$$

则算符 $\hat{A}$ 对态 $|\Psi\rangle$ 的作用与（一般不同的）态 $|\Phi\rangle$ 成正比：

$$\hat{A} |\Psi\rangle = \alpha |\Phi\rangle \tag{10}$$

系数 α 是一个复数，取决于这对态和算符 $\hat{A}$。这个系数是态 $|\Psi\rangle$ 和 $|\Phi\rangle$ 之间的 $\hat{A}$ 的矩阵元，可以记作

$$\alpha = \left\langle \Phi \middle| \hat{A} \middle| \Psi \right\rangle \tag{11}$$

作用于 Hilbert 空间的算符一般互不对易。量子力学的公理之一是对应原理，即在经典极限中，$\hbar \to 0$，算符应有效地变为数，并在经典极限中相互对易。

正则量子化的过程包括：对于满足 Poisson 括号 $\{q,p\}_{PB} = 1$ 的经典正则对 (q,p)，需要关联一对作用于态的 Hilbert 空间 $\mathcal{H}$ 的算符 $\hat{q}$ 和 $\hat{p}$，它们服从正则对易关系：

$$[\hat{q},\hat{p}] = i\hbar \qquad [\hat{q},\hat{q}] = [\hat{p},\hat{p}] = 0 \tag{12}$$

这里 $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ 是算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的对易子：

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{13}$$

特别地，两个不对易的算子无法同时对角化。因此，不可能在同一物理状态下以任意精度同时测量两个不对易的观测量。这就是不确定性原理。

根据这一规定，经典 Hamiltonian $H(q,p)$ 是动力学变量 q 和 p 的函数，我们为其分配了一个算符 $\hat{H}(\hat{q},\hat{p})$，这个算符是用相应的算符代替动力学变量得到的。其他经典动力学量在量子力学中同样与作用于态的 Hilbert 空间的量子算符相关联。此外，在量子力学中，所有与经典物理量相关联的算符都是相对于定义在 Hilbert 空间 $\mathcal{H}$ 中的内积的 hermitian 算符。也就是说，如果 $\hat{A}$ 是一个算子，而 $\hat{A}^{\dagger}$ 是 $\hat{A}$ 的伴随，

$$\left\langle \Psi \middle| \hat{A}^{\dagger} \middle| \Phi \right\rangle \equiv \left\langle \Phi \middle| \hat{A} \middle| \Psi \right\rangle^{*} \tag{14}$$

则当且仅当 $\hat{A}=\hat{A}^{\dagger}$（有合适的边界条件）时，$\hat{A}$ 是 hermitian 的。

系统在 t 时刻的量子力学状态 $|\Psi(t)\rangle$ 服从 Schrödinger 方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle=\hat{H}(\hat{q},\hat{p})|\Psi(t)\rangle \tag{15}$$

态 $|\Psi(t)\rangle$ 由初态 $|\Psi(0)\rangle$ 唯一确定。因此，在量子力学中，就像在经典力学中一样，Hamiltonian 是物理系统的态的（无穷小）时间演化的生成元。

总是可以选择特定算符是对角的基。例如，如果算符是正则坐标 $\hat{q}$，那么一组可能的基就是以 q 标记的 $\hat{q}$ 的本征态，即

$$\hat{q}|q\rangle=q|q\rangle \tag{16}$$

基 $\{|q\rangle\}$ 是正交且完备的：

$$\langle q|q'\rangle=\delta(q-q') \qquad \hat{I}=\int dq\,|q\rangle\langle q| \tag{17}$$

态矢 $|\Psi\rangle$ 可以在任意基上展开。如果基是 $\{|q\rangle\}$，则展开为

$$|\Psi\rangle=\sum_q\Psi(q)|q\rangle\equiv\int_{-\infty}^{+\infty}dq\Psi(q)|q\rangle \tag{18}$$

其中使用了坐标 q 的特征值为实数的特性。展开式的系数 $\Psi(q)$，

$$\Psi(q)=\langle q|\Psi\rangle \tag{19}$$

(即在该态下发现系统处于坐标 q 所需的振幅)，是坐标表示中态 $|\Psi\rangle$ 的波函数的值。

由于正则动量 $\hat{p}$ 与 $\hat{q}$ 不对易，因此它在这种表象中不是对角的。正如在经典力学中一样，在量子力学中，动量算符 $\hat{p}$ 是无穷小位移生成元。考虑态 $|q\rangle$ 和 $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}\right)|q\rangle$。容易证明后者就是态 $|q+a\rangle$，因为

$$\hat{q}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}\right)|q\rangle\equiv\hat{q}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-ia}{\hbar}\right)^n\hat{p}^n|q\rangle \tag{20}$$

利用对易关系 $[\hat{q},\hat{p}]=i\hbar$，容易证明

$$[\hat{q},\hat{p}^n]=i\hbar n\hat{p}^{n-1} \tag{21}$$

因此可以写出

$$\hat{q}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}\right)|q\rangle=(q+a)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}\right)|q\rangle \tag{22}$$

所以

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}\right)|q\rangle=|q+a\rangle \tag{23}$$

这是一个幺正变换，即

$$\left(\exp\left(-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}\right)\right)^{-1}=\left(\exp\left(-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}\right)\right)^{\dagger} \tag{24}$$

现在，可以利用这一特性计算矩阵元

$$\left\langle q\middle|\exp\left(\frac{i}{\hbar}a\hat{p}\right)\middle|\Psi\right\rangle\equiv\Psi\left(q+a\right) \tag{25}$$

对于无穷小的 a，它可以近似为

$$\Psi\left(q+a\right)\approx\Psi\left(q\right)+\frac{i}{\hbar}a\left\langle q|\hat{p}|\Psi\right\rangle+\cdots \tag{26}$$

$\hat{p}$ 的矩阵元必须满足

$$\left\langle q|\hat{p}|\Psi\right\rangle=\frac{\hbar}{i}\lim_{a\to0}\frac{\Psi\left(q+a\right)-\Psi\left(q\right)}{a} \tag{27}$$

因此，算符 $\hat{p}$ 由微分算符表示：

$$\left\langle q|\hat{p}|\Psi\right\rangle\equiv\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\Psi\left(q\right)=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\left\langle q|\Psi\right\rangle \tag{28}$$

不难发现，算符的坐标表象是

$$\hat{p}=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q} \tag{29}$$

和坐标算符 q 满足对易关系 $[\hat{q},\hat{p}]=i\hbar$.

2 场论的正则量子化

现在把量子力学公理应用于经典场论。结果是 QFT。为简单起见，首先考虑标量场 $\phi\left(x\right)$ 的情况。已经看到，在给定 Lagrangian 密度 $\mathcal{L}\left(\phi,\partial_\mu\phi\right)$ 的情况下，一旦定义了正则动量 $|pi\left(x\right)$：

$$\Pi\left(x\right)=\frac{\delta\mathcal{L}}{\delta\partial_0\phi\left(x\right)} \tag{30}$$

就可以得到 Hamiltonian。在给定的时间面 x_0 上，经典 Hamiltonian 为

$$H=\int d^3x\left[\Pi\left(\mathbf{x},x_0\right)\partial_0\phi\left(\mathbf{x},x_0\right)-\mathcal{L}\left(\phi,\partial_\mu\phi\right)\right] \tag{31}$$

我们通过为经典理论中的每个动力学变量分配一个作用于系统量子态的 Hilbert 空间的 hermitian 算符，来量子化这一理论。因此，场 $\hat{\phi}\left(\mathbf{x}\right)$ 和正则动量 $\hat{\Pi}\left(\mathbf{x}\right)$ 都是作用于 Hilbert 空间的算符。这些算符服从等时正则对易关系：

$$\left[\hat{\phi}\left(\mathbf{x}\right),\hat{\Pi}\left(\mathbf{y}\right)\right]=i\hbar\delta\left(\mathbf{x}-\mathbf{y}\right) \tag{32}$$

在场的表象中，Hilbert 空间是波函数 Ψ 的矢量空间，波函数是（在固定时间）场构型的泛函，用 $\{\phi(\mathbf{x})\}$ 表示。用这种符号表示，波函数（即在给定构型中找到场的态的振幅）为

$$\Psi[\{\phi(\mathbf{x})\}] \equiv \langle\{\phi(\mathbf{x})\}|\Psi\rangle \tag{33}$$

在这种表象中，场是对角的算符：

$$\left\langle\{\phi\}\middle|\hat{\phi}(\mathbf{x})\middle|\Psi\right\rangle \equiv \phi(x)\langle\{\phi(\mathbf{x})\}|\Psi\rangle = \phi(x)\Psi[\{\phi\}] \tag{34}$$

在这种表象中正则动量 $\hat{\Pi}(\mathbf{x})$ 不是对角的，但它作为泛函微分算符作用于波函数：

$$\left\langle\{\phi\}\middle|\hat{\Pi}(\mathbf{x})\middle|\Psi\right\rangle \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{\delta}{\delta\phi(\mathbf{x})}\Psi[\{\phi\}] \tag{35}$$

刚才描述的是 QFT 的 Schrödinger 绘景。在这个绘景中，与往常一样，算符与时间无关，但态与时间相关，并满足 Schrödinger 方程：

$$i\hbar\partial_0\Psi[\{\phi\},x_0] = \hat{H}\Psi[\{\phi\},x_0] \tag{36}$$

对于具有经典 Lagrangian $\mathcal{L}$ 的标量场 ϕ 的特殊情况，

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\partial_\mu\phi)^2 - V(\phi) \tag{37}$$

量子力学 Hamiltonian 算符 $\hat{H}$ 为

$$\hat{H} = \int d^3x\left\{\frac{1}{2}\hat{\Pi}^2(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\left(\nabla\hat{\phi}(\mathbf{x})\right)^2 + V(\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}))\right\} \tag{38}$$

定态是 Hamiltonian $\hat{H}$ 的本征态 $\hat{H}$。

尽管可以进一步利用 Schrödinger 绘景，但波函数的操作很快就会变得非常繁琐。因此通常使用 Heisenberg 绘景。

在 Schrödinger 绘景，系统的时间演化被编码为态的时间依赖性。相反，在 Heisenberg 绘景中，算符含时，而态不含时。Heisenberg 绘景的算符服从量子力学运动方程。

令 $\hat{A}$ 是作用于态的 Hilbert 空间的某个算符。用 $\hat{A}_H(x_0)$ 表示时间 x_0 时的 Heisenberg 算符，对于有含时 Hamiltonian 的系统，其定义为

$$\hat{A}_H(x_0) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}x_0}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}x_0} \tag{39}$$

可以直接检验出 $\hat{A}_H(x_0)$ 服从运动方程：

$$i\hbar\partial_0\hat{A}_H(x_0) = \left[\hat{A}_H(x_0),\hat{H}\right] \tag{40}$$

注意在经典极限中，动力学变量 $A(x_0)$ 遵循经典运动方程

$$\partial_0 A(x_0) = \{A(x_0),H\}_{PB} \tag{41}$$

其中假定 A 中的所有时间依赖都来自场（“坐标”）及其正则动量的时间依赖。

在 Heisenberg 绘景中，$\hat{\phi}(\mathbf{x}, x_0)$ 和 $\hat{\Pi}(\mathbf{x}, x_0)$ 都是服从量子力学运动方程的含时算符：

$$i\hbar\partial_0\hat{\phi}(\mathbf{x}, x_0) = \left[\hat{\phi}(\mathbf{x}, x_0), \hat{H}\right] \quad i\hbar\partial_0\hat{\Pi}(\mathbf{x}, x_0) = \left[\hat{\Pi}(\mathbf{x}, x_0), \hat{H}\right] \tag{42}$$

Heisenberg 场算符 $\hat{\phi}(\mathbf{x}, x_0)$ 和 $\hat{\Pi}(\mathbf{x}, x_0)$（从现在起省略副标号“$H$”）服从等时对易关系：

$$\left[\hat{\phi}(\mathbf{x}, x_0), \hat{\Pi}(\mathbf{y}, x_0)\right] = i\hbar\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \tag{43}$$

3 自由标量场论的量子化

现在量子化相对论标量场 $\phi(x)$ 的理论。具体来说，考虑一个自由实标量场 ϕ，其 Lagrangian 密度为

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\partial_\mu\phi)(\partial^\mu\phi) - \frac{1}{2}m^2\phi^2 \tag{44}$$

自由实标量场的量子力学 Hamiltonian $\hat{H}$ 为

$$\hat{H} = \int d^3x \left[\frac{1}{2}\hat{\Pi}^2(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\left(\nabla\hat{\phi}(\mathbf{x})\right)^2 + \frac{1}{2}m^2\hat{\phi}^2(\mathbf{x})\right] \tag{45}$$

其中 $\hat{\phi}$ 和 $\hat{\Pi}$ 满足等时对易关系（$\hbar = c = 1$ 的单位）：

$$\left[\hat{\phi}(\mathbf{x}, x_0), \hat{\Pi}(\mathbf{y}, x_0)\right] = i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \tag{46}$$

在 Heisenberg 表象中，$\hat{\phi}$ 和 $\hat{\Pi}$ 是含时的算子，而态则不含时。场算符服从运动方程：

$$i\partial_0\hat{\phi}(\mathbf{x}, x_0) = \left[\hat{\phi}(\mathbf{x}, x_0), \hat{H}\right] \qquad i\partial_0\hat{\Pi}(\mathbf{x}, x_0) = \left[\hat{\Pi}(\mathbf{x}, x_0), \hat{H}\right] \tag{47}$$

这些都是算符方程。经过一些代数运算，场和正则动量的 Heisenberg 运动方程为

$$\partial_0\hat{\phi}(\mathbf{x}, x_0) = \hat{\Pi}(\mathbf{x}, x_0) \tag{48}$$

$$\partial_0\hat{\Pi}(\mathbf{x}, x_0) = \nabla^2\hat{\phi}(\mathbf{x}, x_0) - m^2\hat{\phi}(\mathbf{x}, x_0) \tag{49}$$

经过代换得出标量场算符的场方程：

$$\left(\partial^2 + m^2\right)\hat{\phi}(x) = 0 \tag{50}$$

因此，场算符 $\hat{\phi}(x)$ 满足 Klein-Gordon 方程作为其 Heisenberg 运动方程。

3.1 场展开

通过 Fourier 变换来求解场的运动方程，

$$\hat{\phi}(x) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hat{\phi}(\mathbf{k}, x_0) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \tag{51}$$

其中 $\hat{\phi}(\mathbf{k}, x_0)$ 是 $\hat{\phi}(x)$ 的 Fourier 振幅。通过要求 $\hat{\phi}(x)$ 满足 Klein-Gordon 方程，我们发现 $\hat{\phi}(\mathbf{k}, x_0)$ 应满足

$$\partial_0^2 \hat{\phi}(\mathbf{k}, x_0) + \left(\mathbf{k}^2 + m^2\right) \hat{\phi}(\mathbf{k}, x_0) = 0 \tag{52}$$

另外，由于 $\hat{\phi}(\mathbf{x}, x_0)$ 是实 hermitian 场算符，因此 $\hat{\phi}(\mathbf{k}, x_0)$ 是 $\hat{\phi}(x)$ 必须满足

$$\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{k}, x_0) = \hat{\phi}(-\mathbf{k}, x_0) \tag{53}$$

$\hat{\phi}(\mathbf{k}, x_0)$ 的时间依赖是平庸的。把 $\hat{\phi}(\mathbf{k}, x_0)$ 写成两个项的和：

$$\hat{\phi}(\mathbf{k}, x_0) = \hat{\phi}_+(\mathbf{k}) e^{i\omega(\mathbf{k})x_0} + \hat{\phi}_-(\mathbf{k}) e^{-i\omega(\mathbf{k})x_0} \tag{54}$$

算符 $\hat{\phi}_+(\mathbf{k})$ 和 $\hat{\phi}_+^\dagger(\mathbf{k})$ 并不独立，因为场 $\hat{\phi}(\mathbf{x}, x_0)$ 的实数条件意味着

$$\hat{\phi}_+(\mathbf{k}) = \hat{\phi}_-^\dagger(-\mathbf{k}) \qquad \hat{\phi}_+^\dagger(\mathbf{k}) = \hat{\phi}_-(-\mathbf{k}) \tag{55}$$

只要 $\omega(\mathbf{k})$ 由下式给出，该展开就是运动方程（Klein-Gordon 方程）的解

$$\omega(\mathbf{k}) = \sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2} \tag{56}$$

定义算符 $\hat{a}(\mathbf{k})$ 及其伴随 $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k})$

$$\hat{a}(\mathbf{k}) = 2\omega(\mathbf{k}) \hat{\phi}_-(\mathbf{k}) \qquad \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) = 2\omega(\mathbf{k}) \hat{\phi}_-^\dagger(\mathbf{k}) \tag{57}$$

算子 $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k})$ 和 $\hat{a}(\mathbf{k})$ 服从（广义）产生-湮灭算符代数：

$$\left[\hat{a}(\mathbf{k}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}')\right] = (2\pi)^3 2\omega(\mathbf{k}) \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \tag{58}$$

以算符 $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k})$ 和 $\hat{a}(\mathbf{k})$ 表示，场算符变为

$$\hat{\phi}(x) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2\omega(\mathbf{k})} \left[\hat{a}(\mathbf{k}) e^{-i\omega(\mathbf{k})x_0 + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) e^{i\omega(\mathbf{k})x_0 - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\right] \tag{59}$$

其中我们选择对算符进行归一化处理，使相空间因子采用 Lorentz 不变形式 $\frac{d^3k}{2\omega(\mathbf{k})}$

正则动量也可以用类似的方法展开：

$$\hat{\Pi}(x) = -i \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2\omega(k)} \omega(k) \left[\hat{a}(\mathbf{k}) e^{-i\omega(\mathbf{k})x_0 + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} - \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) e^{i\omega(\mathbf{k})x_0 - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\right] \tag{60}$$

注意，在这两种展开中，都存在正负频率的项，正频率的项有产生算符 $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k})$，而负频率的项有湮灭算符 $\hat{a}(\mathbf{k})$。这一观察使得可采取记号

$$\hat{\phi}(x) = \hat{\phi}_+(x) + \hat{\phi}_-(x) \tag{61}$$

其中 $\hat{\phi}_+$ 的展开只有正频项，而 $\hat{\phi}_-$ 的展开只有负频项。这种分解方法将非常有用。

3.2 Hamiltonian 及其谱

现在用算符 $\hat{a}(\mathbf{k})$ 和 $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k})$ 来写 Hamiltonian。结果是

$$\hat{H} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2\omega(\mathbf{k})} \frac{1}{2}\omega(\mathbf{k}) \left(\hat{a}(\mathbf{k})\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) + \hat{a}^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}(\mathbf{k})\right) \tag{62}$$

这个 Hamiltonian 需要相对于基态进行正规排序，现在定义该基态。

A：真空态。令 $|0\rangle$ 为被所有算符 $\hat{a}(\mathbf{k})$ 湮灭的态：

$$\hat{a}(\mathbf{k})|0\rangle = 0 \tag{63}$$

相对于这种称为真空态的态，Hamiltonian 可以写成以下形式

$$\hat{H} =: \hat{H} : +E_0 \tag{64}$$

其中 $:\hat{H}:$ 相对于态 $|0\rangle$ 是正规序的。换句话说，在 $:\hat{H}:$ 中，所有湮灭算符都出现在所有产生算子的右边。因此，正规序算符 $:\hat{H}:$ 可以湮灭真空态

$$:\hat{H}:|0\rangle = 0 \tag{65}$$

实数 E_0 是基态能。在这种情况下，它等于

$$E_0 = \int d^3k \frac{1}{2}\omega(k)\,\delta(0) \tag{66}$$

其中，$\delta(0)$ 是零动量时的 delta 函数，是红外发散量

$$\delta(0) = \lim_{p\to 0}\delta^3(\mathbf{p}) = \lim_{p\to 0}\int \frac{d^3x}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \tag{67}$$

其中 V 是（无限的）空间体积。因此，E_0 是广延的，可以写成 $E_0 = \varepsilon_0 V$，其中 ε_0 是基态能密度。可发现

$$\varepsilon_0 = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{\omega(\mathbf{k})}{2} \equiv \frac{1}{2}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2} \tag{68}$$

式 (68) 是所有振子的零点能之和。这个量在形式上是发散的，因为积分被大动量或短距离的贡献所支配。这是紫外发散。之所以发散，是因为即使在有限的体积内，系统的自由度也是无限的。我们还会在场论中遇到其他类似发散的例子。重要的是记住它们并不是我们方案的产物：它们是由于系统处于连续时空中并具有无限多个自由度这一事实而产生的。

对于这个问题，可以采取两种不同的观点。一种可能是简单地说，基态能并不是一个物理上可观测的量，因为任何实验都只能得到激发能的信息，而在这个理论中，激发

能是有限的。因此，我们可以简单地重新定义能量的零点，去掉这个项。这样，正规序就是一种数学表述，使得所有能量的测量都是相对于基态能而言的。就自由场理论而言，这一减法就足够了，因为它使理论变得有限。

然而，一旦考虑到相互作用，在正式计算物理量时就会出现发散。因此，这一过程需要进一步的减法。另一种方法是引入正规化子或截断。现在理论是有限的，但剩下的任务之一是证明物理学与截止程序无关。这就是重整化群的程序。目前还不知道这些理论中是否应该有一个基本的截断点（即是否如弦理论假设的在短距和高能处存在更基本的自然描述）。然而，很显然，如果要把 QFT 看作是在某种高能尺度以下的有效流体力学理论，那么截断实际上是很自然的。

B：Hilbert 空间。可以通过考察正规序的 Hamiltonian 来构造态的谱：

$$: \hat{H} := \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 \, 2\omega(\mathbf{k})} \omega(\mathbf{k}) \, \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) \, \hat{a}(\mathbf{k}) \tag{69}$$

这个 Hamiltonian 与线动量 $\hat{\mathbf{P}}$ 对易

$$\hat{\mathbf{P}} = \int_{x_0 \text{ fixed}} d^3x \hat{\Pi}(\mathbf{x}, x_0) \nabla \hat{\phi}(\mathbf{x}, x_0) \tag{70}$$

在算符排序不明确的情况下，它是经典线动量 $\mathbf{P}$ 的量子力学版本：

$$\mathbf{P} = \int_{x_0} d^3x T^{0j} \equiv \int_{x_0} d^3x \Pi(\mathbf{x}, x_0) \nabla \phi(\mathbf{x}, x_0) \tag{71}$$

在 Fourier 空间，$\hat{\mathbf{P}}$ 变成

$$\hat{\mathbf{P}} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 \, 2\omega(\mathbf{k})} \mathbf{k} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) \, \hat{a}(\mathbf{k}) \tag{72}$$

正规序 Hamiltonian: $\hat{H}$: 也与谐振子的占据数 $\hat{n}(\mathbf{k})$ 对易，其定义为

$$\hat{n}(\mathbf{k}) \equiv \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) \, \hat{a}(\mathbf{k}) \tag{73}$$

由于 $\{\hat{n}(\mathbf{k})\}$ 和哈密顿 $\hat{H}$ 相互对易，所以可以使用 $\{\hat{n}(\mathbf{k})\}$ 本征态的一组完备集来张成 Hilbert 空间。把 $\hat{n}(\mathbf{k})$ 计数的激发视为具有能量和动量的粒子（在更一般的理论中，它们还具有其他量子数）。它们的 Hilbert 空间有不定数量的粒子，称为 Fock 空间。Fock 空间的态 $\{|\{\hat{n}(\mathbf{k})\}|\}$ 定义为

$$|\{n(\mathbf{k})\}\rangle = \prod_k \mathcal{N}(\mathbf{k}) \left[\hat{a}^\dagger(\mathbf{k})\right]^{n(\mathbf{k})} |0\rangle \tag{74}$$

其中 $\mathcal{N}(\mathbf{k})$ 为归一化常数。这是算符 $\hat{n}(\mathbf{k})$ 的本征态：

$$n(\mathbf{k}) \, |\{n(\mathbf{k})\}\rangle = (2\pi)^3 \, 2\omega(\mathbf{k}) \, n(\mathbf{k}) \, |\{n(\mathbf{k})\}\rangle \tag{75}$$

这些态张成了 Fock 空间的占据数基。

总粒子数算符 $\hat{N}$

$$\hat{N} \equiv \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3\, 2\omega(\mathbf{k})} \hat{n}(\mathbf{k}) \tag{76}$$

与 Hamiltonian $\hat{H}$ 对易，并在此基中是对角的。

$$\hat{N}\left|\{n(\mathbf{k})\}\right\rangle = \int d^3k n(\mathbf{k}) \left|\{n(\mathbf{k})\}\right\rangle \tag{77}$$

这些态的能量为

$$\hat{H}\left|\{n(\mathbf{k})\}\right\rangle = \left[\int d^3k n(\mathbf{k})\, \omega(\mathbf{k}) + E_0\right] \left|\{n(\mathbf{k})\}\right\rangle \tag{78}$$

因此，该态的激发能 $\varepsilon(\{n(\mathbf{k})\})$ 为

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \int d^3k n(\mathbf{k})\, \omega(\mathbf{k}) \tag{79}$$

总线动量算符 $\hat{\mathbf{P}}$ 具有算符排序模糊性。通过要求真空态 $|0\rangle$ 具有平移不变性来解决这个问题：

$$\hat{\mathbf{P}}\left|0\right\rangle = 0 \tag{80}$$

用产生和湮灭算符表示，总动量算符为

$$\hat{\mathbf{P}} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3\, 2\omega(\mathbf{k})} \mathbf{k}\hat{n}(\mathbf{k}) \tag{81}$$

所以，$\hat{\mathbf{P}}$ 在基 $\left|\{\hat{n}(\mathbf{k})\}\right\rangle$ 下是对角的，因为

$$\hat{\mathbf{P}}\left|\{n(\mathbf{k})\}\right\rangle = \left[\int d^3k \mathbf{k} n(\mathbf{k})\right] \left|\{n(\mathbf{k})\}\right\rangle \tag{82}$$

能量最低的态，即真空态 $|0\rangle$，对于所有 $\mathbf{k}$，$n(\mathbf{k}) = 0$，因此真空态的动量为零，并且是平移不变的。

态 $|\mathbf{k}\rangle$ 定义为

$$|\mathbf{k}\rangle \equiv \hat{a}^\dagger(\mathbf{k})\left|0\right\rangle \tag{83}$$

其具有激发能 $\omega(\mathbf{k})$ 和总线动量 $\mathbf{k}$。因此，态 $\{|\mathbf{k}\rangle\}$ 是类似于粒子的激发，其能量色散曲线为

$$E = \sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2} \tag{84}$$

是动量为 $\mathbf{k}$、质量为 m 的相对论粒子的特征。因此，该场论基态的激发是类似粒子的，并具有正能量（相对于真空态）。从以上讨论可以看出，这些粒子是自由的，因为它们的能量和动量是可加的。

3.3 因果律

量子化过程的出发点是在正则场 $\hat{\phi}(x)$ 及其正则动量 $\hat{\Pi}(x)$ 上施加等时对易关系。特别地，不同空间位置上的两个场算符在相同时间对易。但它们会在不同时间对易吗？

为解决这个问题，我们计算对易子 $\Delta(x-y)$：

$$i\Delta(x-y)=\left[\hat{\phi}(x),\hat{\phi}(y)\right] \tag{85}$$

其中 $\hat{\phi}(x)$ 和 $\hat{\phi}(y)$ 分别是时空点 x 和 y 的 Heisenberg 场算符。根据场的 Fourier 展开，场算符可以分成两项之和：

$$\hat{\phi}(x)=\hat{\phi}_+(x)+\hat{\phi}_-(x) \tag{86}$$

其中 $\hat{\phi}_+$ 只包含产生算符和正频率，而 $\hat{\phi}_-$ 只包含湮灭算符和负频率。因此对易子为

$$i\Delta(x-y)=\left[\hat{\phi}_+(x),\hat{\phi}_+(y)\right]+\left[\hat{\phi}_-(x),\hat{\phi}_-(y)\right]+\left[\hat{\phi}_+(x),\hat{\phi}_-(y)\right]+\left[\hat{\phi}_-(x),\hat{\phi}_+(y)\right] \tag{87}$$

前两项总是为零，因为 $\hat{\phi}^+$ 算符相互换向，$\hat{\phi}^-$ 算符也是如此。因此，唯一不为零的贡献是

$$\begin{aligned}i\Delta(x-y)&=\left[\hat{\phi}_+(x),\hat{\phi}_-(y)\right]+\left[\hat{\phi}_-(x),\hat{\phi}_+(y)\right]\\&=\int d\bar{k}\int d\bar{k}'\left\{\left[\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}),\hat{a}(\mathbf{k}')\right]\exp\left(-i\omega(k)x_0+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}+i\omega(k')y_0-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{y}\right)\right.\\&\quad\left.+\left[\hat{a}(\mathbf{k}),\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}')\right]\exp\left(i\omega(k)x_0-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-i\omega(k')y_0+i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{y}\right)\right\}\end{aligned} \tag{88}$$

其中

$$\int d\bar{k}\equiv\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3\,2\omega(\mathbf{k})} \tag{89}$$

此外，利用产生算符和湮灭算符的对易关系，我们发现算符 $\Delta(x-y)$ 与单位算符成正比，因此，它实际上是一个函数。其为

$$i\Delta(x-y)=\int d\bar{k}\left[e^{i\omega(\mathbf{k})(x_0-y_0)-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}-e^{-i\omega(\mathbf{k})(x_0-y_0)+i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}\right] \tag{90}$$

借助 Lorentz 不变函数 $\epsilon(k^0)$，其定义如下

$$\epsilon\left(k^0\right)=\frac{k^0}{|k^0|}\equiv\text{sign}\left(k^0\right) \tag{91}$$

可以把 $\Delta(x-y)$ 写成明显的 Lorentz 不变形式：

$$i\Delta(x-y)=\int\frac{d^4k}{(2\pi)^3}\delta\left(k^2-m^2\right)\epsilon\left(k^0\right)e^{-ik\cdot(x-y)} \tag{92}$$

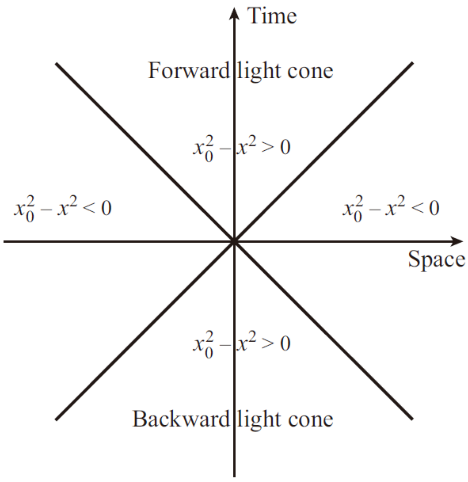

图 1: Minkowski 时空。

式 (92) 的积分为零，除非满足质量在壳条件

$$k^2 - m^2 = 0 \tag{93}$$

注意 $\Delta(x-y)$ 满足初始条件

$$\partial_0 \Delta|_{x_0=y_0} = -\delta^3(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \tag{94}$$

在相同时间 $x_0 = y_0$ 时对易子消失：

$$\Delta(\mathbf{x}-\mathbf{y}, 0) = 0 \tag{95}$$

此外，根据 Lorentz 不变性，如果时空点 x 和 y 之间相隔一个类空间隔，$(x-y)^2 < 0$，$\Delta(x-y)$ 也会为零。情况一定是这样，因为 $\Delta(x-y)$ 显然是 Lorentz 不变的。因此，如果它在等时为零，即 $(x-y)^2 = (x_0-y_0)^2 - (\mathbf{x}-\mathbf{y})^2 = -(\mathbf{x}-\mathbf{y})^2 < 0$，那么它必须在 $(x-y)^2$ 为负值的所有事件中为零。这意味着，对于没有因果联系的事件 x 和 y，$\Delta(x-y) = 0$，而 $\Delta(x-y)$ 只对有因果联系的事件不为零。

4 量子理论的对称性

在讨论经典场论时，连续全局对称性的存在意味着运动常量的存在。此外，运动常量是无穷小对称变换的生成元。现在探讨对称性在量子理论中的作用。

在量子理论中，所有物理量都由作用于态的 Hilbert 空间的算符来表示。经典的说法是，如果一个量 A 与 Hamiltonian 的 Poisson 括号消失，则该量 A 是守恒的

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\}_{PB} = 0 \tag{96}$$

在量子理论中变成算符恒等式

$$i\frac{d\hat{A}_H}{dt}=\left[\hat{A}_H,\hat{H}\right]=0 \tag{97}$$

我们使用的是 Heisenberg 表象。那么量子理论的运动常量就是与 Hamiltonian 对易的算符：$\left[\hat{A}_H,\hat{H}\right]=0$。

因此，令荷 $\hat{Q}$ 是一个 hermitian 算符，其通过对应原理与一个经典守恒流 $j^\mu(x)$ 关联，

$$\hat{Q}=\int_{x_0\ \text{fixed}} d^3x\hat{j}^0(\mathbf{x},x_0) \tag{98}$$

当且仅当荷 $\hat{Q}$ 是与 Hamiltonian $\hat{H}$ 对易的算符时：

$$\left[\hat{Q},\hat{H}\right]=0 \tag{99}$$

量子理论有对称性。如果是这样，那么荷 $\hat{Q}$ 就构成了该理论的 Hilbert 空间中对称变换的 Lie 群代数的生成元的表示。与对称性相关的变换 $\hat{U}(\alpha)$

$$\hat{U}(\alpha)=\exp\left(i\alpha\hat{Q}\right) \tag{100}$$

是作用于系统 Hilbert 空间的幺正变换。

例如，对于平移不变的系统，经典的能量-动量 4-矢量 P^μ，

$$P^\mu=\int_{x_0} d^3xT^{0\mu} \tag{101}$$

是守恒的。在量子理论中，P^0 成为 Hamiltonian 算符 $\hat{H}$，P^i 成为总动量算符 $\hat{\mathbf{P}}$。在自由标量场的情况下，这些算符相互对易：$\left[\hat{\mathbf{P}},\hat{H}\right]=0$。因此，系统的本征态具有良定义的总能量和总动量。由于 $\mathbf{P}$ 是经典理论的无穷小平移的生成元，因此很容易验证它与 $\phi(x)$ 场的等时 Poisson 括号为

$$\left\{\phi(\mathbf{x},x_0),P^j\right\}_{PB}=\partial_x^j\phi \tag{102}$$

在量子理论中，等价的说法是场算符 $\hat{\phi}(x)$ 和总动量算符 $\hat{\mathbf{P}}$ 满足等时对易关系：

$$\left[\hat{\phi}(\mathbf{x},x_0),\hat{P}^j\right]=i\partial_x^j\hat{\phi}(\mathbf{x},x_0) \tag{103}$$

因此，场算符 $\hat{\phi}(\mathbf{x}+\mathbf{a},x_0)$ 和 $\hat{\phi}(\mathbf{x},x_0)$ 的关系是

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}+\mathbf{a},x_0)=e^{i\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{P}}}\hat{\phi}(\mathbf{x},x_0)e^{-i\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{P}}} \tag{104}$$

基态 $|0\rangle$ 的平移不变性意味着它是一个总动量为零的状态：$\hat{\mathbf{P}}|0\rangle=0$。对于有限位移 $\mathbf{a}$，可得

$$e^{i\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{P}}}|0\rangle=|0\rangle \tag{105}$$

表示态 $|0\rangle$ 在平移下不变，属于全局平移群的一维表示。

现在讨论全局内部对称性的情况。最简单的情况是自由复标量场 $\phi(x)$，其 Lagrangian $\mathcal{L}$ 在全局相位变换下是不变的。如果 ϕ 是复数场，它可以分解成实部和虚部：

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_1 + i\phi_2\right) \tag{106}$$

自由复标量场 ϕ 的经典 Lagrangian 为

$$\mathcal{L} = \partial_\mu \phi^* \partial^\mu \phi - m^2 \phi^* \phi \tag{107}$$

现在分裂成两个独立项的和，

$$\mathcal{L}(\phi) = \mathcal{L}(\phi_1) + \mathcal{L}(\phi_2) \tag{108}$$

其中 $\mathcal{L}(\phi_1)$ 和 $\mathcal{L}(\phi_2)$ 分别是自由实标量场 ϕ_1 和 ϕ_2 的拉格朗日。同样，正则动量 $\Pi(x)$ 和 $\Pi^*(x)$ 分解为

$$\Pi(x) = \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta\partial_0\phi} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\dot{\phi}_1 - i\dot{\phi}_2\right) \qquad \Pi^*(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\dot{\phi}_1 + i\dot{\phi}_2\right) \tag{109}$$

在量子理论中，算符 $\hat{\phi}$ 和 $\hat{\phi}^\dagger$ 不再相等，$\hat{\Pi}$ 和 $\hat{\Pi}^\dagger$ 也不再相等。尽管如此，正则量子化过程告诉我们，$\hat{\phi}$ 和 $\hat{\Pi}$（以及 $\hat{\phi}^\dagger$ 和 $\hat{\Pi}^\dagger$）满足等时正则对易关系：

$$\left[\hat{\phi}(\mathbf{x}, x_0), \hat{\Pi}(\mathbf{y}, x_0)\right] = i\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \tag{110}$$

自由复标量场理论的求解方法与求解自由实标量场的方法相同。现在必须引入两个算符 $\hat{a}_1(\mathbf{k})$ 和 $\hat{a}_1^\dagger(\mathbf{k})$ 以及 $\hat{a}_2(\mathbf{k})$ 和 $\hat{a}_2^\dagger(\mathbf{k})$ 的代数，而不是单一的产生-湮灭代数。$\hat{a}(\mathbf{k})$ 和 $\hat{b}(\mathbf{k})$ 定义为

$$\begin{aligned} \hat{a}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}_1(\mathbf{k}) + i\hat{a}_2(\mathbf{k})\right) \qquad & \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}_1^\dagger(\mathbf{k}) - i\hat{a}_2^\dagger(\mathbf{k})\right) \\ \hat{b}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}_1(\mathbf{k}) - i\hat{a}_2(\mathbf{k})\right) \qquad & \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}_1^\dagger(\mathbf{k}) + i\hat{a}_2^\dagger(\mathbf{k})\right) \end{aligned} \tag{111}$$

满足代数

$$\left[\hat{a}(\mathbf{k}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}')\right] = \left[\hat{b}(\mathbf{k}), \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}')\right] = (2\pi)^3\, 2\omega(\mathbf{k})\, \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \tag{112}$$

而其他对易子都为零。

现在场的 Fourier 展开为

$$\begin{aligned} \hat{\phi}(x) &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3\, 2\omega(\mathbf{k})}\left(\hat{a}(\mathbf{k})\, e^{-ik\cdot x} + \hat{b}^\dagger(\mathbf{k})\, e^{ik\cdot x}\right) \\ \hat{\phi}^\dagger(x) &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3\, 2\omega(\mathbf{k})}\left(\hat{b}(\mathbf{k})\, e^{-ik\cdot x} + \hat{a}^\dagger(\mathbf{k})\, e^{ik\cdot x}\right) \end{aligned} \tag{113}$$

其中 $\omega(\mathbf{k}) = \sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2}$ 且 $k_0 = \omega(\mathbf{k})$。在这种符号表示下，正规序 Hamiltonian 为

$$: \hat{H} := \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2\omega(\mathbf{k})} \omega(\mathbf{k}) \left(\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) \hat{a}(\mathbf{k}) + \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}) \hat{b}(\mathbf{k}) \right) \tag{114}$$

正规序总线动量 $\hat{\mathbf{P}}$ 由类似的表达式给出：

$$\hat{\mathbf{P}} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2\omega(\mathbf{k})} \mathbf{k} \left(\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) \hat{a}(\mathbf{k}) + \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}) \hat{b}(\mathbf{k}) \right) \tag{115}$$

有 a 和 b 两种量子。场 ϕ 产生 b-量子，也湮灭 a-量子。真空态没有量子，被两种算符湮灭：$\hat{a}(\mathbf{k})|0\rangle = \hat{b}(\mathbf{k})|0\rangle = 0$。由于 $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k})|0\rangle$ 和 $\hat{b}^\dagger(\mathbf{k})|0\rangle$ 分别有一个 a 型粒子和一个 b 型粒子，因此单粒子态具有双重简并性。这些状态具有完全相同的能量 $\omega(\mathbf{k})$ 和动量 $\mathbf{k}$。因此，对于能量和动量的每个值，都有一个可能态的二维空间。这种简并性是对称性的结果：这些态形成多重态。

产生这种对称性的量子算符是什么？经典守恒流为

$$j_\mu = i\phi^* \overleftrightarrow{\partial_\mu} \phi \tag{116}$$

在量子理论中，j_μ 成为正规序算符 $: j_\mu :$。相应的全局荷 $\hat{Q}$ 为

$$\begin{aligned} \hat{Q} =&: \int d^3x i \left(\hat{\phi}^\dagger \partial_0 \hat{\phi} - \left(\partial_0 \hat{\phi}^\dagger \right) \hat{\phi} \right) : \\ &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2\omega(\mathbf{k})} \left(\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) \hat{a}(\mathbf{k}) - \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}) \hat{b}(\mathbf{k}) \right) \\ &= \hat{N}_a - \hat{N}_b \end{aligned} \tag{117}$$

其中 $\hat{N}_a$ 和 $\hat{N}_b$ 分别是 a 和 b 类型量子的粒子数算符。由于 $\left[\hat{Q}, \hat{H}\right] = 0$，差值 $\hat{N}_a - \hat{N}_b$ 是守恒的。由于这一性质是对称性的结果，因此只要 $\left[\hat{Q}, \hat{H}\right] = 0$，它有望在比这里讨论的简单自由场情况更一般的理论中成立。因此，尽管 $\hat{N}_a$ 和 $\hat{N}_b$ 一般来说可能不会分别守恒，但如果对称性是精确的，差值 $\hat{N}_a - \hat{N}_b$ 将是守恒的。

现在简要讨论如何在态的谱中实现这种对称性。

4.1 真空态

真空态 $N_a = N_b = 0$。因此，生成元 $\hat{Q}$ 会湮灭真空态

$$\hat{Q}|0\rangle = 0 \tag{118}$$

因此，真空态在对称性下是不变的（即是单态）：

$$|0\rangle' = e^{i\hat{Q}\alpha}|0\rangle = |0\rangle \tag{119}$$

由于态 $|0\rangle$ 总是定义在一个总的相位因子上，因此它张成了一个在对称性下不变的态的一维子空间。这就是真空扇区，对于本问题来说是平庸的。

4.2 单粒子态

有两个线性独立的单粒子态，即 $|+,\mathbf{k}\rangle$ 和 $|-,\mathbf{k}\rangle$，定义如下

$$|+,\mathbf{k}\rangle=\hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k})|0\rangle \qquad |-,\mathbf{k}\rangle=\hat{b}^{\dagger}(\mathbf{k})|0\rangle \tag{120}$$

两种态具有相同的动量 $\mathbf{k}$ 和能量 $\omega(\mathbf{k})$。这些态的 $\hat{Q}$-量子数，称为它们的电荷，为

$$\begin{aligned}\hat{Q}|+,\mathbf{k}\rangle&=\left(\hat{N}_a-\hat{N}_b\right)\hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k})|0\rangle=\hat{N}_a\hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k})|0\rangle=+|+,\mathbf{k}\rangle\\ \hat{Q}|-,\mathbf{k}\rangle&=\left(\hat{N}_a-\hat{N}_b\right)\hat{b}^{\dagger}(\mathbf{k})|0\rangle=-|-,\mathbf{k}\rangle\end{aligned} \tag{121}$$

因此

$$\hat{Q}|\sigma,\mathbf{k}\rangle=\sigma|\sigma,\mathbf{k}\rangle \tag{122}$$

其中 $\sigma=\pm1$。因此，态 $\hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k})|0\rangle$ 带正电荷，而 $\hat{b}^{\dagger}(\mathbf{k})|0\rangle$ 带负电荷。

在有限变换 $\hat{U}(\alpha)=\exp\left(i\alpha\hat{Q}\right)$ 的下，态 $|\pm,\mathbf{k}\rangle$ 变换如下：

$$\begin{aligned}|+,\mathbf{k}\rangle'&=\hat{U}(\alpha)|+,\mathbf{k}\rangle=\exp\left(i\alpha\hat{Q}\right)|+,\mathbf{k}\rangle=e^{i\alpha}|+,\mathbf{k}\rangle\\ |-,\mathbf{k}\rangle'&=\hat{U}(\alpha)|-,\mathbf{k}\rangle=\exp\left(i\alpha\hat{Q}\right)|-,\mathbf{k}\rangle=e^{-i\alpha}|-,\mathbf{k}\rangle\end{aligned} \tag{123}$$

场 $\hat{\phi}(x)$ 本身的变换为

$$\hat{\phi}'(x)=\exp\left(-i\alpha\hat{Q}\right)\hat{\phi}(x)\exp\left(i\alpha\hat{Q}\right)=e^{i\alpha}\hat{\phi}(x) \tag{124}$$

这是因为

$$\left[\hat{Q},\hat{\phi}(x)\right]=-\hat{\phi}(x) \qquad \left[\hat{Q},\hat{\phi}^{\dagger}(x)\right]=\hat{\phi}^{\dagger}(x) \tag{125}$$

因此单粒子态是二重简并的，每个态在对称群下都会发生非平庸变换。

通过观察复数场 $\hat{\phi}$ 的 Fourier 展开，可以发现 $\hat{\phi}$ 是两个项的和：一组正频率项，用 $\hat{\phi}_{+}$ 表示，和一组负频率项，用 $\hat{\phi}_{-}$ 表示。在这种情况下，所有正频项都会产生 b 型粒子（带负电荷），而负频项则会湮灭 a 型粒子（带正电荷）。态 $|\pm,\mathbf{k}\rangle$ 通常被称为粒子和反粒子：粒子具有静质量 m、动量 $\mathbf{k}$ 和电荷 +1，而反粒子具有相同的质量和动量，但带有电荷-1。电荷是以电磁电荷 $-e$ 为单位测量的。

最后，注意该理论还包含一个额外的算符：电荷共轭算符 $\hat{C}$，它将粒子映射为反粒子，反之亦然。这个算符与 Hamiltonian 对易：$\left[\hat{C},\hat{H}\right]=0$。这一特性确保了谱在电荷共轭作用下是不变的。换句话说，对于每一个电荷量为 Q 的态，都存在一个电荷量为 $-Q$ 的态，所有其他量子数都相同。

对自由复标量场的分析可以很容易地扩展到在更一般的对称群 G 下不变的系统。因此，电荷算符 $\hat{Q}^a$ 的数量等于群中的生成元数量。电荷算符代表了系统的 Hilbert（或

Fock）空间中的群的生成元，并且与生成元本身遵守相同的对易关系。理论的谱的态必须在对称群的不可约表示下变换。

但基态是否总是不变的呢？在初等量子力学中，有一个 Wigner 和 Weyl 提出的定理：对于有限系统，基态在对称群的作用下总是单态。然而，自然界中有许多系统（如磁体、Higgs 相和超导体）的基态在 Hamiltonian 的对称性下并非不变的。这种现象称为自发对称性破缺，在简单的自由场理论中不会发生，但在相互作用场理论中却会发生。