

## Chapter 7

# 全同粒子和波函数的交换对称性

### 7.1 多粒子波函数

前面我们讨论两个自旋的耦合的时候, 已经涉及到了两个粒子“波函数”. 比如两个自旋的态矢量可以写成

$$|\alpha\rangle = \sum_{m_s=\pm 1/2, m'_s=\pm 1/2} c_{m_s, m'_s} |m_s\rangle_1 |m'_s\rangle_2 \quad (7.1)$$

这里  $c_{m_s, m'_s}$  可以理解为波函数.

我们描述单粒子的空间运动状态时, 可以用坐标表象.

$$|\psi\rangle = \int dx \psi(\vec{r}) |\vec{r}\rangle \quad (7.2)$$

$\psi(\vec{r}, t)$  是单粒子波函数(考虑了它会随时间演化).  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  是  $\vec{r}$  处粒子出现的几率密度. 如果我们研究的系统里面有两个粒子, 那么体系的波函数应该写为  $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$ .  $|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2$  是在  $\vec{r}_1$  附近  $d\vec{r}_1$  发现粒子1, 在  $\vec{r}_2$  附近  $d\vec{r}_2$  内发现粒子2 的几率密度. 满足归一化

$$\int |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = 1 \quad (7.3)$$

和  $S - eq$ :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)}{\partial t} = H \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \quad (7.4)$$

其中

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + V(\vec{r}_1) + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_2) + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (7.5)$$

$V(\vec{r}_1), V(\vec{r}_2)$  分别是两个粒子在外场中的势能,  $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  是粒子之间的相互作用势能.  $p_1$  和  $p_2$  分别是粒子1和2的动量算符:

$$\hat{p}_1 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}_1}, \quad \hat{p}_2 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}_2} \quad (7.6)$$

分离变量解为

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \psi_E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}, \quad (7.7)$$

其中空间波函数  $\psi_E$  满足

$$\left( \frac{p_1^2}{2m_1} + V(\vec{r}_1) + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_2) + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right) \psi_E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \psi_E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (7.8)$$

我们来研究一个例子: 一维无限深势阱 (宽  $a$ ) 中有两个粒子

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + V(x_1) + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(x_2) + V(x_1, x_2). \quad (7.9)$$

$V(x_1), V(x_2)$ 是阱,  $V(x_1, x_2)$ 是相互作用, 我们忽略相互作用. 则

$$\hat{H} = \hat{h}_1(x_1) + \hat{h}_2(x_2), \quad (7.10)$$

$\hat{h}_1, \hat{h}_2$ 分别是两个粒子单独在阱中的Hamiltonian, 本征方程(7.8)中 $\psi_E(x_1, x_2)$ 可再分离变量

$$\psi_E(x_1, x_2) = \psi_{E_1}(x_1)\psi_{E_2}(x_2). \quad (7.11)$$

即

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_{E_1}(x_1)\psi_{E_2}(x_2) &= \hat{h}_1(x_1)\psi_{E_1}(x_1)\psi_{E_2}(x_2) + \hat{h}_2(x_2)\psi_{E_1}(x_1)\psi_{E_2}(x_2) \\ &= E\psi_{E_1}(x_1)\psi_{E_2}(x_2) \end{aligned}$$

两边除以 $\psi_{E_1}(x_1)\psi_{E_2}(x_2)$ , 有

$$\hat{h}_1(x_1)\psi_{E_1}(x_1) = E_1\psi_{E_1}(x_1), \quad (7.12)$$

$$\hat{h}_2(x_2)\psi_{E_2}(x_2) = E_2\psi_{E_2}(x_2), \quad (7.13)$$

$$E = E_1 + E_2. \quad (7.14)$$

波函数和能级我们知道

$$\begin{aligned} \psi_{E_1}(x_1) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n_1\pi}{a} x_1, & E_1 &= \frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{n_1^2\pi^2}{a^2} \\ \psi_{E_2}(x_2) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n_2\pi}{a} x_2, & E_2 &= \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{n_2^2\pi^2}{a^2} \end{aligned}$$

$\psi_{E_1}(x_1)\psi_{E_2}(x_2)$ 可简写为 $\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)$ , 或者利用Dirac记号, 写为 $|E\rangle = |n_1\rangle_1|n_2\rangle_2$ ,

$$\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) = {}_2\langle x_2|_1\langle x_1|E\rangle. \quad (7.15)$$

抽象地说, 这种情况就是

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) \quad (7.16)$$

粒子1处于a态, 粒子2处于b态.

## 7.2 交换对称与反对称, 不可分辨的全同粒子

如果两个粒子是不同的粒子: 质量, 自旋, 电荷中至少一个不同, 以上讨论没有问题.

如果两个粒子是全同粒子, 以上讨论实际上区分了它们: 粒子1在 $n_1$ 态, 粒子2在 $n_2$ 态, 而这是不可能的, 没有办法给两个粒子“上色”, 微观粒子的特征“非常少”!

**量子力学基本原理: 全同粒子不可分辨!**

因此

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = |\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)|^2 \quad (7.17)$$

第一个自变量为第一个粒子的位置, 第二个自变量是第二个粒子的位置: 左边为粒子1在 $\vec{r}_1$ , 粒子2在 $\vec{r}_2$ , 右边为粒子1在 $\vec{r}_2$ , 粒子2在 $\vec{r}_1$ . 那么

$$c\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1), \quad (7.18)$$

其中 $|c| = 1$ .

引入交换算符 $\hat{P}_{12}$ :

$$\hat{P}_{12}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = c\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (7.19)$$

再来一次:

$$\hat{P}_{12}\hat{P}_{12}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = c^2\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (7.20)$$

但是 $\hat{P}_{12}\hat{P}_{12} = 1$ , 因为两次交换等于没换, 所以

$$c^2 = 1, c \text{ 有两种可能} \begin{cases} 1 & \text{Bosons} & \text{交换对称} \\ -1 & \text{Fermions} & \text{反对称} \end{cases}$$

就是说, 全同粒子波函数必须满足

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \pm\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

这是量子力学的原理.

- 所有自旋为 $\hbar$ 整数倍的例子为波色子, 包括复合粒子, 原子, 介子, 光子
- 所有自旋为 $\hbar$ 半整数倍的粒子为费米子, 质子, 电子, 夸克
- 自旋与交换对称性的关系是相对论的结论, 我们这里接受

回到前面的例子, 若两个粒子全同:  $m_1 = m_2$ , 在 $n_1 \neq n_2$ 的情况下, 能量本征态应为:

$$\begin{aligned} \text{Bosons} : \psi_E(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) + \psi_{n_2}(x_1)\psi_{n_1}(x_2)] \\ \text{Fermions} : \psi_E(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) - \psi_{n_2}(x_1)\psi_{n_1}(x_2)] \end{aligned}$$

或者写成

$$|\psi_E\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n_1\rangle_1|n_2\rangle_2 + |n_2\rangle_1|n_1\rangle_2), \text{Boson} \quad (7.21)$$

$$|\psi_E\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n_1\rangle_1|n_2\rangle_2 - |n_2\rangle_1|n_1\rangle_2), \text{Fermion} \quad (7.22)$$

意思是: 一个粒子处于 $n_1$ 态, 另外一个处于 $n_2$ 态.

当 $n_1 = n_2$ 时,

$$\text{Boson} : \psi_E(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2), \quad (7.23)$$

$$\text{Fermion} : \psi_E(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) - \psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_1) = 0 \quad (7.24)$$

两个玻色子可以处于一个状态, 而两个费米子不行, 这就是**泡利不相容原理**.

可以看到,  $P_{12}$ 也可理解为两个粒子交换了状态.

由于粒子全同, 哈密顿算符是交换不变的:

$$P_{12}H(1, 2) = H(2, 1) = H(1, 2) \quad (7.25)$$

因此

$$\begin{aligned} [P_{12}, H(1, 2)]\psi(r_1, r_2) &= P_{12}(H(1, 2)\psi(r_1, r_2)) - H(1, 2)P_{12}\psi(r_1, r_2) \\ &= H(2, 1)\psi(r_2, r_1) - H(1, 2)\psi(r_2, r_1) = 0 \end{aligned} \quad (7.26)$$

这说明 $P_{12}$ 与 $H(1, 2)$ 有共同本征态, 其实就是前面找到的对称或反对称形式. 而这种对称性或反对称性是守恒的, 不随时间变化的.

然而前面的讨论没有考虑自旋状态。如果考虑自旋状态, 粒子的状态应该是 $\psi_n(\vec{r})\chi_{m_s}$ , 再要求交换后波函数对称或反对称。

比如电子, (7.22)可以写为

$$|\psi_E\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n_1 m_s\rangle_1 |n_2 m'_s\rangle_2 - |n_2 m'_s\rangle_1 |n_1 m_s\rangle_2) \quad (7.27)$$

写成波函数

$$\begin{aligned} \psi_E(x_1, x_2) &= {}_2\langle x_2 | {}_1\langle x_1 | \psi_E \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{n_1}(x_1)\chi_{m_s}(1)\psi_{n_2}(x_2)\chi_{m'_s}(2) \\ &\quad - \psi_{n_2}(x_1)\chi_{m'_s}(1)\psi_{n_1}(x_2)\chi_{m_s}(2)) \end{aligned} \quad (7.28)$$

如果我们把量子数 $(n, m_s)$ 统一记为 $k$ , 那么上式可以写为

$$|\psi_E\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|k\rangle_1 |k'\rangle_2 - |k'\rangle_1 |k\rangle_2) \quad (7.29)$$

或者简写为波函数

$$\psi_E(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_k(1)\psi_{k'}(2) - \psi_{k'}(1)\psi_k(2)) \quad (7.30)$$

当 $n_1 = n_2$ 时, 如果 $m_{s1} = 1/2 \neq m_{s2} = -1/2$ , 系统状态是

$$|\psi_E\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n_1, 1/2\rangle_1 |n_1, -1/2\rangle_2 - |n_1, -1/2\rangle_1 |n_1, 1/2\rangle_2) \quad (7.31)$$

写成波函数

$$\psi_E(x_1, x_2) = {}_2\langle x_2 | {}_1\langle x_1 | \psi_E \rangle = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_1}(x_2)[\chi_{\frac{1}{2}}(1)\chi_{-\frac{1}{2}}(2) - \chi_{-\frac{1}{2}}(1)\chi_{\frac{1}{2}}(2)] \quad (7.32)$$

我们看到此时空间波函数交换对称, 自旋波函数反对称, 整个波函数满足交换反对称。其实在 $n_1 \neq n_2$ 时也可以构造这样的波函数, 比如:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) + \psi_{n_2}(x_1)\psi_{n_1}(x_2)]\chi_{00} \quad (7.33)$$

它是 $(n_1, 1/2; n_2, -1/2)$ 与 $(n_2, 1/2; n_1, -1/2)$ 的叠加态。

同理, 在 $n_1 \neq n_2$ 时, 交换反对称还可以是空间波函数反对称, 自旋对称。

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) - \psi_{n_2}(x_1)\psi_{n_1}(x_2)] \begin{cases} \chi_{11} \\ \chi_{10} \\ \chi_{1-1} \end{cases} \quad (7.34)$$

### 7.2.1 一般性讨论

我们现在考虑任意两个无相互作用全同粒子构成的系统:  $H = h(1) + h(2)$ ,  $h(1)$ 与 $h(2)$ 形式相同, 其本征方程为

$$h\varphi_k = \epsilon_k\varphi_k, \quad (7.35)$$

$k$ 为一组好量子数, 显然

$$H\varphi_{k_1}(1)\varphi_{k_2}(2) = (\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2})\varphi_{k_1}(1)\varphi_{k_2}(2) \quad (7.36)$$

根据前面的讨论, 系统的能量本征态应该是对称或反对称的。

- Bosons:

$$\psi_{k_1 k_2}^{(S)} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{k_1}(\vec{r}_1) \varphi_{k_2}(\vec{r}_2) + \varphi_{k_2}(\vec{r}_1) \varphi_{k_1}(\vec{r}_2)], & k_1 \neq k_2 \\ \varphi_{k_1}(\vec{r}_1) \varphi_{k_1}(\vec{r}_2) & k_1 = k_2 \end{cases}$$

- Fermions

$$\begin{aligned} \psi_{k_1 k_2}^{(A)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{k_1}(\vec{r}_1) \varphi_{k_2}(\vec{r}_2) - \varphi_{k_2}(\vec{r}_1) \varphi_{k_1}(\vec{r}_2)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_{k_1}(\vec{r}_1) & \varphi_{k_1}(\vec{r}_2) \\ \varphi_{k_2}(\vec{r}_1) & \varphi_{k_2}(\vec{r}_2) \end{vmatrix} \end{aligned}$$

必须  $k_1 \neq k_2$ . Pauli不相容原理!

可推广到  $N$  个粒子的情况

$$\begin{aligned} &P_{ij} \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) \\ &= \psi(x_1, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N) \\ &= \pm \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) \end{aligned}$$

例如, 3个 *Bosons* 处于不同的  $k_1, k_2, k_3$  态:

$$\psi_{k_1 k_2 k_3}^{(S)} = \frac{1}{\sqrt{3!}} (\psi_{k_1}(1) \psi_{k_2}(2) \psi_{k_3}(3) + \psi_{k_2}(1) \psi_{k_1}(2) \psi_{k_3}(3) + \dots)$$

$3!$  是  $k_1, k_2, k_3$  的所有不同排列的数目.

两个处于  $k_1$ , 一个处于  $k_2 \neq k_1$ :

$$\psi_{k_1 k_1 k_3}^{(S)} = \frac{\sqrt{2!}}{\sqrt{3!}} [\psi_{k_1}(1) \psi_{k_1}(2) \psi_{k_3}(3) + \psi_{k_3}(1) \psi_{k_1}(2) \psi_{k_1}(3) + \psi_{k_1}(1) \psi_{k_3}(2) \psi_{k_1}(3)]$$

$2!$  是相同的两个态  $k_1, k_2$  的排列数.

三个都处于同一个  $k_1$ :

$$\psi_{k_1 k_1 k_1}^{(S)} = \psi_{k_1}(1) \psi_{k_1}(2) \psi_{k_1}(3)$$

总的项数是全排列数除以相同态之间的排列数。因此归一化因子选为项数分之一再开方.

3个 *Fermion* 必须在不同的态

$$\psi_{k_1 k_2 k_3}^{(A)} = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(1) & \psi_{k_1}(2) & \psi_{k_1}(3) \\ \psi_{k_2}(1) & \psi_{k_2}(2) & \psi_{k_2}(3) \\ \psi_{k_3}(1) & \psi_{k_3}(2) & \psi_{k_3}(3) \end{vmatrix}$$

### 7.3 量子统计

考虑一个能级 $\epsilon$ 是三重简并的:  $k_1, k_2, k_3$ , 如图7.1所示, 两个粒子占据 ( $E = 2\epsilon$ ), 可以有几种不同的状态?

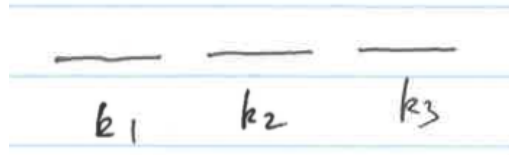


Figure 7.1: 一个三重简并的能级.

图7.2给出了粒子是玻色子、费米子或者可分辨三种情况下的微观状态数.

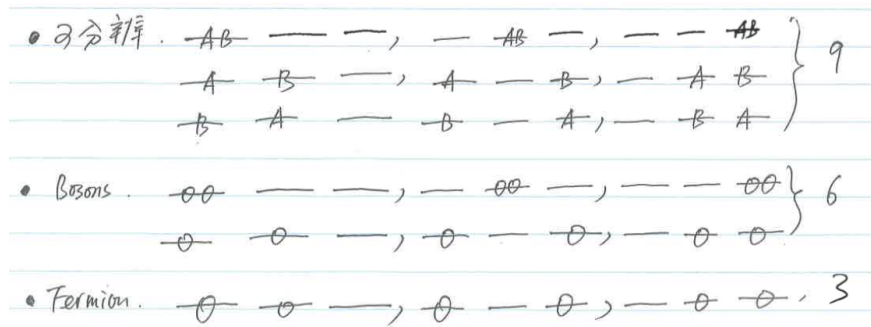


Figure 7.2: 两个粒子占据三重简并的能级对应的量子态.

如果是 $N$ 个粒子占据 $f$ 重简并的能级, 会有多少种情况?

如果一个能级的简并度小于系统的粒子数, 此时费米子将不得不寻找其他能级去占据。

我们看到波函数的交换对称性可以限制一个系统所允许的微观状态数目! 当然, 我们这里讨论的是没有相互作用的多粒子系统, 在给定总能量的情况. 这种限制可以严重改变一个宏观物理系统的性质! 量子力学不是只有微观效应!