

全同多粒子

首先我们需要定义全同粒子。自然界中存在各种不同种类的粒子，如电子，质子，中子，光子， π 介子等等。对于两个不同的粒子如电子和质子，我们可以从它们的带电性，质量来区分，尽管它们的自旋是相同的，又如质子和中子，可以从带电量来区分，质量也稍有差别。但如果是两个电子，它们的静止质量、电荷、自旋、磁矩等各种性质完全一样，我们就无法区分这两个粒子了。在量子力学中，把属于同一类的粒子称为全同粒子(*identical particle*)。全同性来自于量子性，一方面由于测不准原理，我们无法同时确定位置和动量，也就是说没有轨道的概念，粒子出现在某个地方，我们只能知道它出现了，但我们无法知道它是怎样出现的；另一方面，由于量子化，如电子在 z 方向上自旋测量值只能是自旋朝上和自旋朝下两个值，缺乏连续分布也阻止了我们精确辨别两个粒子。那么这种全同性会带来什么新的现象呢？这一点我们在之前讲两个电子状态的时候已经提到过，自旋三重态和自旋单态对轨道波函数的要求不同。

全同粒子的交换对称(反对称)

我们从一个典型的实验出发来认识全同粒子以及由此带来的全同对称性(参见Feynman物理学讲义卷三3-4)。如图所示，考虑两个物体的弹性碰撞问题，在质心坐标系中，碰撞前如果两个物体的速度方向相反，则碰撞后两者的速度也是相反的。假定两个粒子A和B相互碰撞，其中A散射到方向1而B散射到方向2。我们分两种可能来讨论。

对于可分辨粒子，如图1中显示的 α 粒子和 O^{2+} 粒子之间的碰撞，我们是可以精确的确定散射到1方向上 α 粒子和 O^{2+} 粒子的数目，因为两者是可以区分出来的。假定 α 粒子散射到1方向而 O^{2+} 粒子散射到2方向(用计数器收集)。观测到发生这样一种散射过程的几率正比于 $|f(\theta)|^2$ (实质与散射截面有关，后面章节讲述)，其中 $f(\theta)$ 为散射振幅。当然也可能发生另外一种过程， α 粒子散射到2方向而 O^{2+} 粒子散射到1方向上。假定不存在由自旋之类所定义的特殊方向，这一散射过程的几率是应该是 $|f(\pi - \theta)|^2$ ，因为这正好等于在第一个过程中把计数器1移到 $\pi - \theta$ 角度处。当然振幅确切的讲应该是 $e^{i\delta} f(\pi - \theta)$ ，可以有位相差。如果要统计在1方向上测量得到的总粒子几率则为 $|f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2$ ，是几率的直接相加，与位相无关。

现在我们来考察全同粒子，因为我们不能区分散射到1的粒子到底是来自于哪一个粒子源，所以发现粒子的几率就应该是 $|f(\theta) + e^{i\delta} f(\pi - \theta)|^2$ ，不是几率的直接相加，与位相有关。显然全同粒子的散射与可分辨粒子的散射是不同的，这一点我们留到散射这一章详细讲。

现在我们来考察全同粒子的交换有什么特殊性。前面第一个过程我们假定振幅为 $f(\theta)$ ，第二个过程的振幅则为 $e^{i\delta} f(\pi - \theta)$ 。假定两个粒子发生交换，那么第一个过程的振幅变成 $e^{i\delta} f(\theta)$ ，第二个过程的振幅则为 $e^{2i\delta} f(\pi - \theta)$ 。如果再交换一次，那么第一个过程的振幅变成 $e^{2i\delta} f(\theta)$ ，第二个过程的振幅则为 $e^{3i\delta} f(\pi - \theta)$ 。显然经过两次交换后回到了原来的状态，所以要求 $e^{2i\delta} = 1$ ，即 $e^{i\delta} = 1$ 或者 -1 两个全同粒

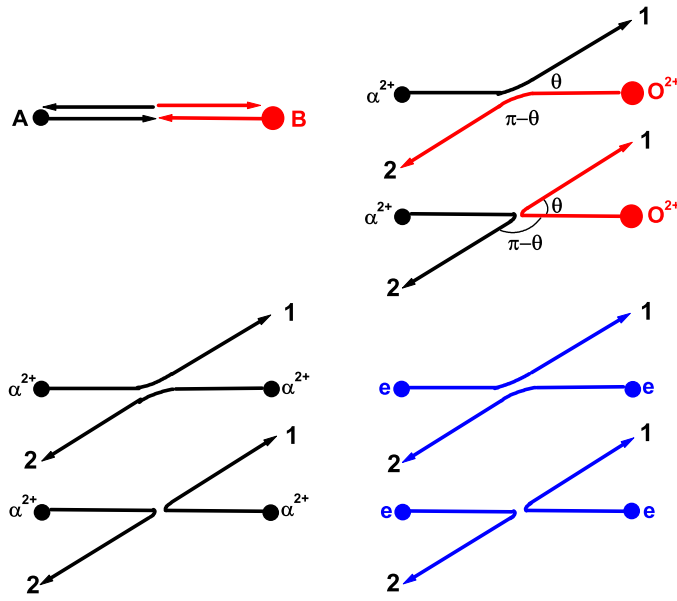


Figure 1: 两粒子的散射

子交换前后的振幅或者是相同的符号，或者是相反的符号。我们把正号相干的粒子称为玻色子(*boson*)，把负号相干的粒子称为费米子(*fermion*)。或者说交换两个玻色子，波函数保持不变，而交换两个费米子，波函数改号。

这种交换对称或者反对称性我们还可以从另外一个角度看待。任何可观测量对于交换两个全同粒子应该是不变的，这包括了 *Hamiltonian* 算符。如氢原子中两个电子组成的体系，

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|},$$

显然当两个电子交换时， H 是不变的，即 $P_{12}HP_{12}^{-1} = H$ ，其中 P_{12} 是两个电子交换的算符，即

$$[P_{12}, H] = 0.$$

由于 H 算符具有交换对称性，这也对波函数提出了额外的要求。下面我们从一般的表述来研究全同多粒子系统的交换对称性(反对称性)。

考虑一个 N 个全同粒子组成的多体系的情况，忽略粒子相互作用，量子态用波函数 $\psi(q_1, q_2, \dots, q_n)$ 描述， $q_i (i = 1, 2, \dots, N)$ 表示每一个粒子的全部坐标(空间坐标和自旋指标等)。 P_{ij} 表示第 i 个粒子和第 j 个粒子的全部坐标的交换操作，即

$$P_{ij}\psi(q_1, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_n) = \psi(q_1, \dots, q_j, \dots, q_i, \dots, q_n).$$

由于全同性， $P_{ij}\psi$ 和 ψ 是无法分辨的，所以只能认为它们描述的是同一个量子态，因此它们最多可以相差一个常数因子，即

$$P_{ij}\psi = C\psi.$$

用 P_{ij} 再作用一次得

$$P_{ij}^2\psi = CP_{ij}\psi = C^2\psi,$$

显然 $P_{ij}^2 = 1$, 所以 $C^2 = 1$, 因而

$$C = \pm 1,$$

即 P_{ij} 只有两个本征值。所以全同粒子系的波函数必须满足

$$P_{ij}\psi = \psi, \quad P_{ij}\psi = -\psi.$$

凡是满足 $P_{ij}\psi = \psi$ 的波函数, 称为对称波函数; 满足 $P_{ij}\psi = -\psi$ 的波函数, 称为反对称波函数。

实验表明对于给定的一类全同粒子, 其多粒子体系的波函数的交换对称性是完全确定的, 而且与粒子的自旋有确定的关系。凡自旋为 \hbar 的整数倍($s = 0, 1, 2, \dots$)的粒子, 波函数对于两粒子交换总是对称的, 称为玻色子。例如 π 介子, 光子, 在统计物理中遵循*Bose-Einstein*统计; 凡自旋为 \hbar 的半奇数倍($s = 1/2, 3/2, \dots$)的粒子, 波函数对于两粒子交换总是反对称的, 称为费米子。例如电子, 质子, 中子等, 在统计物理中遵循*Fermi-Dirac*统计。

全同粒子系的波函数

两个全同粒子体系波函数

设现有两个全同粒子(不计相互作用),

$$H = h(q_1) + h(q_2),$$

其中 $h(q)$ 表示单粒子的*Hamiltonian*。 $h(q_1)$ 与 $h(q_2)$ 形式上完全相同, 只不过 $q_1 \leftrightarrow q_2$ 互换而已。显然, $[P_{12}, H] = 0$ 。设 $h(q)$ 的本征方程为

$$h(q)\psi_k(q) = \varepsilon_k\psi_k(q),$$

其中 ε_k 为单粒子能量, $\psi_k(q)$ 为相应的归一化单粒子波函数, k 代表一组完备的量子数。

假定两个粒子分别处于 ψ_{k_1} 和 ψ_{k_2} 态, 则 $\psi_{k_1}(q_1)\psi_{k_2}(q_2)$ 和 $\psi_{k_2}(q_1)\psi_{k_1}(q_2)$ 对应的能量都是 $\varepsilon_{k_1} + \varepsilon_{k_2}$, 这种与交换相联系的简并称为交换简并, 但这两个波函数还不一定具有交换对称性(反对称)。

费米子: 要求波函数是交换反对称的, 归一化的波函数可以构建为

$$\begin{aligned} \psi_{k_1 k_2}^a(q_1, q_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{k_1}(q_1)\psi_{k_2}(q_2) - \psi_{k_1}(q_2)\psi_{k_2}(q_1)] = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - P_{12})\psi_{k_1}(q_1)\psi_{k_2}(q_2) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(q_1) & \psi_{k_1}(q_2) \\ \psi_{k_2}(q_1) & \psi_{k_2}(q_2) \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

也就是说, 两个全同费米子体系的波函数可以用*Slater*行列式表征。特别地, 当 $k_1 = k_2$ 时, 上式给出的是 $\psi^a = 0$, 即不存在这样的状态。或者说, 不允许有两个全同的费米子处于同一单粒子状态(k 代表了一组完备的量子态, 如果有自旋, 要求包括自旋态的量子数), 这就是著名的泡利不相容原理(*Pauli's exclusion principle*)。

玻色子: 我们知道波函数要求是交换对称的。当 $k_1 \neq k_2$ 时, 归一化的波函数可以构建为

$$\psi_{k_1 k_2}^s(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{k_1}(q_1) \psi_{k_2}(q_2) + \psi_{k_1}(q_2) \psi_{k_2}(q_1)] = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + P_{12} \psi_{k_1}(q_1) \psi_{k_2}(q_2)),$$

$\frac{1}{\sqrt{2}}$ 是归一化因子。当 $k_1 = k_2$ 时,

$$\psi_{k_1 k_2}^s(q_1, q_2) = \psi_k(q_1) \psi_k(q_2).$$

玻色子不受*Pauli*原理的限制, 允许两个完全相同的粒子处在同一状态。

N 个全同粒子体系的波函数

现在考虑 N 个全同粒子组成体系的波函数的表示。

费米子如果 $N = 3$ 则 $\psi_{k_1}(q_1) \psi_{k_2}(q_2) \psi_{k_3}(q_3)$ 是一个可能的波函数, 但还没有考虑交换对称性(我们取 $k_1 < k_2 < k_3$)。三个粒子的交换操作有6种可能, 分别为 $P_{12}(k_1 \leftrightarrow k_2)$, $P_{23}(k_2 \leftrightarrow k_3)$, $P_{31}(k_3 \leftrightarrow k_1)$, 和 $P_{12}P_{23}$, $P_{23}P_{31}$ 以及不变操作 I 。前面三个交换一次, 所以应该带负号, 后面三个交换二次或者不变, 应该带正号, 所以波函数可以写成

$$\begin{aligned} \psi_{k_1 k_2 k_3}^a(q_1, q_2, q_3) &= A \psi_{k_1}(q_1) \psi_{k_2}(q_2) \psi_{k_3}(q_3) \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left[\begin{aligned} &(\psi_{k_1}(q_1) \psi_{k_2}(q_2) \psi_{k_3}(q_3) + \psi_{k_3}(q_1) \psi_{k_1}(q_2) \psi_{k_2}(q_3) + \psi_{k_2}(q_1) \psi_{k_3}(q_2) \psi_{k_1}(q_3) \\ &- \psi_{k_2}(q_1) \psi_{k_1}(q_2) \psi_{k_3}(q_3) - \psi_{k_1}(q_1) \psi_{k_3}(q_2) \psi_{k_2}(q_3) - \psi_{k_3}(q_1) \psi_{k_2}(q_2) \psi_{k_1}(q_3) \end{aligned} \right] \end{aligned}$$

其中, $A = \frac{1}{\sqrt{6}} (I + P_{12}P_{23} + P_{23}P_{31} - P_{12} - P_{23} - P_{31})$, 称为反对称化算符。用*Slater*行列式表示就是

$$\psi_{k_1 k_2 k_3}^a(q_1, q_2, q_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(q_1) & \psi_{k_1}(q_2) & \psi_{k_1}(q_3) \\ \psi_{k_2}(q_1) & \psi_{k_2}(q_2) & \psi_{k_2}(q_3) \\ \psi_{k_3}(q_1) & \psi_{k_3}(q_2) & \psi_{k_3}(q_3) \end{vmatrix}.$$

推广到 N 个全同费米子组成的体系, 假定 $k_1 < k_2 < \dots < k_N$, 则反对称波函数可以表示为

$$\begin{aligned} \psi_{k_1 k_2 \dots k_N}^a(q_1, q_2, \dots, q_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(q_1) & \psi_{k_1}(q_2) & \dots & \psi_{k_1}(q_N) \\ \psi_{k_2}(q_1) & \psi_{k_2}(q_2) & \dots & \psi_{k_2}(q_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_{k_N}(q_1) & \psi_{k_N}(q_2) & & \psi_{k_N}(q_N) \end{vmatrix} \\ &= A \psi_{k_1}(q_1) \psi_{k_2}(q_2) \dots \psi_{k_N}(q_N). \end{aligned}$$

上式中反对称化算符

$$A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum \delta_P P,$$

其中, δ_P 当发生偶数次交换时为1, 发生奇数次交换时为-1。

玻色子: 对于玻色子由于没有*Pauli*不相容原理的限制, 可以有任意数目的玻色子处在相同的单粒子态。设有 n_i 个玻色子处于 k_i 态上, ($i = 1, 2, \dots, N$), $\sum_{i=1}^N n_i = N$ 。这些 n_i 中, 有些可以为0, 有些可以大

于1。对称的多粒子波函数可以表示为

$$\sum_P P \left[\underbrace{\psi_{k_1}(q_1) \cdots \psi_{k_1}(q_{n_1})}_{n_1} \cdot \underbrace{\psi_{k_2}(q_{n_1+1}) \cdots \psi_{k_2}(q_{n_1+n_2}) \cdots}_{n_2} \right],$$

注意，这里 P 只对那些处于不同单粒子态上的粒子进行对换而构建的置换，因为只有这样才能保证上式中的各项的正交性。这样的置换共有 $N!/(n_1!n_2!\cdots n_N!)$ 个。因此归一化的波函数为

$$\psi_{n_1 n_2 \cdots n_N}^s(q_1, q_2, \cdots, q_N) = \sqrt{\frac{\prod_i n_i!}{N!}} \sum_P P[\psi_{k_1}(q_1) \cdots \psi_{k_N}(q_N)].$$

Example 1: 两个质量为 m 、自旋为 $1/2$ 的全同粒子被限制在 x 方向做一维运动。假定两粒子之间的相互作用与自旋无关，而且只与它们的距离有关，形式为

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a/2; \\ \infty, & |x| > a/2, \end{cases}$$

其中 $x = x_1 - x_2$ ， x_1 和 x_2 分别是两个粒子的位置。(提示：只需考虑两粒子间的相对运动)

1) 求系统的基态能量和基态波函数；

2) 如果加上一沿 z 方向的磁场，自旋在此磁场下受到的作用为 $\hat{H}_m = -\lambda(\sigma_z^1 + \sigma_z^2)$ ，其中 σ 是Pauli矩阵， $\lambda = \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}$ 。求此时系统的基态能量和基态波函数。

解：相对坐标，折合质量为 $\mu = m/2$ 。1) 一维无限深势阱的解为

$$\epsilon_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{ma^2} \quad \text{波函数为 } \psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \begin{cases} \cos \frac{n\pi x}{a} & n = 1, 3, \dots \quad \text{偶宇称} \\ \sin \frac{n\pi x}{a} & n = 2, 4, \dots \quad \text{奇宇称} \end{cases}$$

另一方面，两个全同粒子的波函数或者为自旋单态，或者为自旋三重态，分别对应于交换反对称和交换对称。费米子要求总波函数交换反对称，所以基态为

$$E_0 = \epsilon_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2} \quad |\Psi_0\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} |00\rangle$$

2) 自旋部分的能量为

$$E_0^s = -2\lambda \leftrightarrow |11\rangle \quad E_1^s = 0 \leftrightarrow |10\rangle \text{ 或者 } |00\rangle \quad E_2^s = 2\lambda \leftrightarrow |1\bar{1}\rangle$$

可见基态为

$$E_0 = -2\lambda + \epsilon_2 = -\frac{4\pi^2\hbar^2}{ma^2} + \frac{4\hbar^2\pi^2}{ma^2} = 0 \quad |\Psi_0\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi x}{a} |11\rangle$$