波粒二象性

光的波粒二象性

$$E = h\nu$$

$$p = \frac{h}{\lambda} \text{ 或 } p = \hbar k$$

光既能显示出波的特性，又能显示出粒子的特性，但是在任何一个特定的事例中，光要么显示波动性，要么显示粒子性，两者绝不会同时出现。光在传播时显示波动性，在转移能量时显示粒子性。

物质波理论

德布罗意假设：所有的物质粒子都具有波粒二象性。

任何物体伴随以波，而且不可能将物体的运动和波的传播分开。

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

$$E^2 = p^2c^2 + mc^2$$

态叠加原理

由于薛定谔方程是线性的，解具有叠加性；

若ψ_1和ψ_2都是方程的解，则它们的线性叠加

$$\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2$$

也是方程的解，其中C_1、C_2是任意复数。

不确定原理

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

当粒子被局限在x方向的一个有限的范围Δx内时，它所相应的动量分量p_x有一个不确定的数值范围Δp_x。

应用：

束缚粒子的最小平均动能

谱线的自然宽度

泡利不相容原理

在一个多电子系统中，不可能有两个或两个以上的电子具有完全相同的四个量子数（n, l, m_l, m_s）。

原子中的每一个状态只能容纳一个电子。

在费米子组成的系统中，不能有两个或更多的粒子处于完全相同的状态。

对于相同费米子组成的系统，其波函数必须是反对称的。

全同粒子

内禀属性：所有电子都有相同的质量、电荷、大小以及自旋。

全同粒子：内禀属性完全相同的粒子。

电子是全同粒子，电子是不可分辨的。

交换对称性：如果将两个电子相互交换，则原子的状态不发生任何变化。

交换算符$\hat{p}_{12}$

考虑两个全同粒子组成的体系，其波函数由$\psi(1,2)$表示。

$$\hat{p}_{12}\,\psi(1,2) = \psi(2,1)$$

$\psi(2,1)$与$\psi(1,2)$描述的量子态完全一样，最多相差一个常数λ

$$\hat{p}_{12}\,\psi(1,2) = \lambda\psi(1,2)$$

作用两次$\hat{p}_{12}$，

$$\hat{p}^2{}_{12}\,\psi(1,2) = \lambda^2\psi(1,2)$$

由于两次作用$\hat{p}_{12}$后，体系须回到原来的状态，$\hat{p}^2{}_{12} = 1$，则$\lambda^2 = 1$。

$$\lambda = \pm 1$$

对称波函数

$$\psi(1,2) = \psi(2,1)$$

反对称波函数

$$\psi(1,2) = -\psi(2,1)$$

体系波函数可以有$\psi_I = \psi_a(1)\psi_b(2)$和$\psi_{II} = \psi_b(1)\psi_a(2)$

体系总的波函数是ψ_I和ψ_{II}的线性叠加

$$\psi_S(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(1)\psi_b(2)+\psi_b(2)\psi_a(1)]$$

$$\psi_A(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(1)\psi_b(2)-\psi_b(2)\psi_a(1)]$$

对于对称波函数，ψ_S，两个粒子可以同时处于相同状态；对于反对称波函数，ψ_A，两个全同粒子不能同时处于相同的状态。

全同粒子体系波函数的交换对称性与粒子自旋：

玻色子：**自旋为0或为$\hbar$整数倍**的粒子（如π介子、光子、……），全同粒子**体系的波函数是对称的**；交换对称的；两个全同粒子可以同时处于相同状态；

费米子：**自旋为$\hbar$的半奇数倍**的粒子（如电子、质子、中子、……），全同粒子**体系的波函数是反对称的**；交换反对称的；两个全同粒子不能同时处于相同的状态；

$$\psi(x,y,z,s_z,t)=\phi(x,y,z,t)\chi(s_z,t)$$

$\phi(x,y,z,t)$表示空间部分；$\chi(s_z,t)$表示自旋部分。

体系的波函数ψ是反对称的：当ϕ对称时，χ是反对称的；当ϕ反对称时，χ是对称的。

两个电子自旋的合成$\left(s_z=\pm\frac{1}{2}\right)$，合成后的总自旋波函数

交换对称的：

$$\psi_{S,S}=\begin{cases}\chi_{1,1}=\alpha(1)\alpha(2)\\ \chi_{1,0}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)+\alpha(2)\beta(1)]\\ \chi_{1,-1}=\beta(1)\beta(2)\end{cases}$$

交换反对称的：

$$\psi_{S,A}=\chi_{0,0}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)]$$

α表示自旋向上的状态$\left(s_z=\frac{1}{2}\right)$；$\beta$表示自旋向下的状态$\left(s_z=-\frac{1}{2}\right)$。

此处两个电子相互独立，忽略了它们之间的相互作用

总的反对称波函数

$$\psi = \{\phi_0(r_1)\phi_{nl}(r_2) - \phi_0(r_2)\phi_{nl}(r_1)\}\begin{pmatrix}\chi_{1,1}\\ \chi_{1,0}\\ \chi_{1,-1}\end{pmatrix}$$

$$\psi = \{\phi_0(r_1)\phi_{nl}(r_2) + \phi_0(r_2)\phi_{nl}(r_1)\}\chi_{0,0}$$

若空间部分是反对称的，则自旋部分是对称的；反之亦然。
0和nl分别表示一个粒子处于基态另一个粒子处于激发态。

应用
He原子的基态

原子的大小

金属中的原子

原子核内独立核子的运动

核内的有色夸克