全同粒子体系

多粒子体系的描写

有N个粒子组成的体系,

体系的波函数应该和所有粒子的坐标以及时间有关:

$$\Psi = \Psi(q_1, q_2, \dots, q_N; t),$$

"坐标"q包括粒子的空间坐标和自旋量子数(也许还有其它的"内部"量子数)。体系的Hamiltonian是:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + U_i(q_i) \right) + V(q_1, \dots, q_N),$$

其中包括了各个粒子的动能和 在外场中的势能以及粒子和粒子之间的相互作用, 由此即可写下体系的Schrödinger方程

全同粒子的不可区别性

假设多粒子体系中的N个粒子是全同粒子

全同粒子就是质量、电荷、自旋等内在性质完全相同的粒子。 全同粒子体系例如多电子原子中的电子、固体中的"公用" 电子、原子核中的核子等

在量子力学中,全同粒子体系与非全同粒子体系有更多的区别。在经典力学中,即使两个粒子是全同的,它们也仍然是可区别的,因为它们各自有自己的轨道

但是在量子力学中,粒子的状态用波函数描写,当两个粒子的波函数在空间中发生重叠的时候,我们无法区分哪个是"第一个"粒子,哪个是"第二个"粒子。所以,在量子理论中有"全同粒子不可区别性原理"

当一个全同粒子体系中各粒子的波函数有重叠的时候,这些全同粒子是不可区别的

波函数的交换对称性和粒子的统计性

对全同粒子体系的波函数引入交换算符 \hat{P}_{ij}

它的作用是把波函数中的第i个粒子和第j个粒子的坐标交换位置:

$$\widehat{P}_{ij}\Psi(\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots;t) = \Psi(\cdots,q_j,\cdots,q_i,\cdots;t), \quad (i \neq j)$$

全同粒子的不可区别性告诉我们:这样交换以后的状态与原来的状态是不可区别的,所以,按照量子力学的基本原理(全同性原理),

$$\hat{P}_{ij}\Psi = C\Psi$$
, (C是常数)

$$\hat{P}_{ij}\hat{P}_{ij}\Psi=\Psi,$$
 $C^2=1,$
 $C=+1$ 或者 $-1,$
 $\hat{P}_{ij}\Psi=+\Psi$ 或者 $-\Psi.$ (对任何 $i\neq j$)

若 $\hat{P}_{ij}\Psi=+\Psi$,则称 Ψ 为交换对称波函数,若 $\hat{P}_{ij}\Psi=-\Psi$,则称 Ψ 为交换反对称波函数。

交换对称性或反对称性是全同粒子体系波函数的特殊的、固有的性质,因此也是(微观)粒子的特殊的、固有的性质。它决定了粒子所服从的统计

自旋为整数的粒子,波函数是交换对称的,服从Bose-Einstein 统计,称为玻色子。例如光子(自旋为1)、介子(自旋为0)

自旋为半整数的粒子,波函数是交换反对称的,服从Fermi-Dirac统计,称为费米子。例如电子、质子、中子(自旋都是 $\hbar/2$)

交换对称或反对称波函数的构成

一般地说,一个全同粒子体系的波函数是解Schrödinger方程得到的,未必有确定的交换对称性。所以我们要对它进行"对称化"或"反对称化"

这里只考虑比较简单的情形:无耦合体系,即体系的总波函数是单个粒子波函数的乘积:

$$\psi(q_1,\dots,q_N)=\psi_1(q_1)\dots\psi_N(q_N).$$

这称为单粒子近似

原子核、原子、分子这样的粒子是由质子、中子、电子这些更"基本的"粒子组成的,我们把它们称为"复合粒子"。如果复合粒子的内部自由度是"冻结"的,我们也可以把它们看做是"基本"粒子

那么它们是玻色子还是费米子呢?这里的规则是:如果一个复合粒子包含偶数个费米子,那么它是玻色子;如果它包含奇数个费米子,那么它还是费米子。它所包含的玻色子的数目对此毫无影响

事实上,这正是因为偶数个费米子的总自旋一定是整数,而 奇数个费米子的总自旋一定是半整数,这一点可以由角动量 的合成规则得到说明 以二粒子体系为例,单粒子近似的波函数是

$$\psi(q_1, q_2) = \psi_1(q_1)\psi_2(q_2),$$

对称化的波函数是:

$$\psi_{\rm S}(q_1,q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(q_1)\psi_2(q_2) + \psi_1(q_2)\psi_2(q_1)],$$

而反对称化的波函数是:

$$\psi_{A}(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(q_1)\psi_2(q_2) - \psi_1(q_2)\psi_2(q_1)].$$

对于可区别粒子(波函数 ψ_{I}),

我们可以说系统的状态是"第一个粒子处于状态 ψ_1 ,

第二个粒子处于状态 ψ_2 ",

但是对于不可区别粒子(波函数 ψ_{S} 和 ψ_{A}),我们只能说"有一个粒子处于状态 ψ_{1} ,一个粒子处于状态 ψ_{2} "。

类似的做法可以推广到N个粒子的体系。特别是,一般的反对称化波函数是:

$$\psi_{A}(q_{1},\dots,q_{N}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{1}(q_{1}) & \psi_{1}(q_{2}) & \cdots & \psi_{1}(q_{N}) \\ \psi_{2}(q_{1}) & \psi_{2}(q_{2}) & \cdots & \psi_{2}(q_{N}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{N}(q_{1}) & \psi_{N}(q_{2}) & \cdots & \psi_{N}(q_{N}) \end{vmatrix}.$$

这称为Slater行列式

在 ψ_1, \dots, ψ_N 当中有任何两个是相同的函数时,

$$\psi_{\mathbf{A}}(q_1,\dots,q_N) \equiv 0$$

Pauli不相容原理:不可能有两个或更多的费米子处于完全相同的量子状态中

这是量子力学基本公理之一。它在统计物理中起重要的作用

微观粒子波动性的表现

到目前为止,我们已经了解了量子力学的一系列与经典物理不同的表现:

- 粒子的运动由波函数决定,是几率性的,其动力学演化由薛定鄂方程决定
- 力学量测量值由波函数本征值决定,其平均值是相应力 学量算符在波函数中的积分平均
- 力学量之间能否同时取确定值由力学量算符之间的对易关系决定。不能同时取确定值的情况就是不确定关系

这些新奇的特性都是粒子的波动性在<mark>单粒子身</mark>上的表现。粒子的波动性反映在多粒子系统中就是**全同性原理**

正是由于全同性原理植根于波动性原理,它比其它原理(如系统反射对称性)显得更为基本。例:系统能量本征态不一定就是宇称本征态,但是任何多粒子系统不管是否处于某个本征态,在波函数叠加区域它一定处于全同粒子交换算符的本征态

多粒子系统

多粒子系统本身就带来了某些单粒子系统中没有的复杂性。 例如对单粒子来说:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

但对双自由粒子系统来说,它们的相对坐标和总动量算符却是对易的(练习):

$$[\hat{x}_1 - \hat{x}_2, \hat{p}_1 + \hat{p}_2] = 0$$

所以可以构造一个波函数,使得它是 $\hat{\mathbf{x}}_1 - \hat{\mathbf{x}}_2$ 与 $\hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2$ 的 共同本征函数

在多粒子系统中,虽然不同粒子的力学量算符都相互对易, 也就是说可以同时取确定的值,但是这些可能的测值之间却 可以有某种关联(量子纠缠、非定域性、爱因斯坦之问), 对这些问题的研究一直处于量子力学的前沿领域

Pauli不相容原理

最初不相容原理是Pauli综合反常塞曼效应、原子不同壳层电子数为偶数等现象归纳得到的,Pauli引入了电子自旋的概念来解释壳外电子的填充规律

Red

Blue

Green

粒子物理后来发展中遇到了 Δ^{++} 粒子:

$$\Delta^{++} = uuu$$

这个粒子由三个同样的顶夸克组成,电荷一样,自旋相同(同向),同时局限于一个狭小的空间之中(波函数重叠),似乎违背了Pauli不相容原理

后来发现它们还有一个量子数不同-色电荷(color)。色是量子色动力学的基础,它有三种(不妨设为红、绿、蓝)。三个夸克拥有不同的色荷量子数,所以Pauli不相容原理没有被打破

两个自由粒子的空间波函数:

a) 不考虑全同性:

$$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{i(\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1 + \vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2)},$$

引入质心坐标 $\bar{R}=(\bar{r}_1+\bar{r}_2)/2$ 和相对坐标 $\bar{r}=\bar{r}_1-\bar{r}_2$,总 波矢 $\bar{K}=\bar{k}_1+\bar{k}_2$ 和相对波矢: $\bar{k}=(\bar{k}_1-\bar{k}_2)/2$,波函数为

$$\psi(\vec{R},\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

在以一个粒子为中心,半径为 Γ 的球壳内找到另一个粒子的几率密度为:

$$P(r) = \int \left| \psi(\bar{R}, \bar{r}) \right|^2 d^3 \bar{R} r^2 d\Omega = A r^2.$$

b) 两个全同 Bose 子:

$$\psi_{+}(\bar{r}_{1},\bar{r}_{2}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi\left(\bar{r}_{1},\bar{r}_{2}\right) + \psi\left(\bar{r}_{2},\bar{r}_{1}\right) \right),$$

$$\psi_{+}(\bar{R},\bar{r}) = \frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^{3}} e^{i\bar{R}\cdot\bar{R}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} + e^{-i\bar{k}\cdot\bar{r}} \right) = \frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^{3}} \sqrt{2} \cos\left(\bar{k}\cdot\bar{r}\right) e^{i\bar{K}\cdot\bar{R}},$$

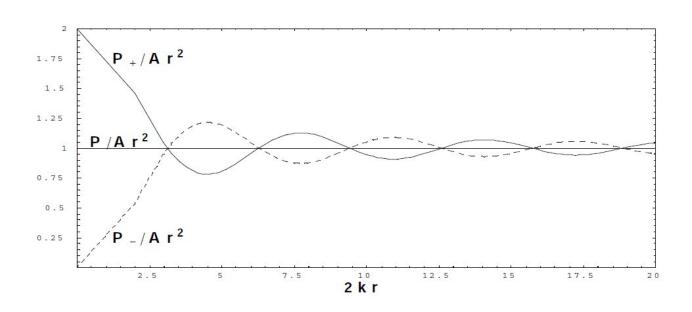
$$P_{+}(r) = \int \left| \psi_{+}(\bar{R},\bar{r}) \right|^{2} d^{3}\bar{R}r^{2} d\Omega = Ar^{2} \left(1 + \frac{\sin 2kr}{2kr} \right)$$

c) 反对称波函数

$$\psi_{-}(\vec{r}_{1}, \vec{r}_{2}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi \left(\vec{r}_{1}, \vec{r}_{2} \right) - \psi \left(\vec{r}_{2}, \vec{r}_{1} \right) \right),$$

$$\psi_{-}(\vec{R}, \vec{r}) = \frac{1}{\left(2\pi\hbar \right)^{3}} \sqrt{2} i \sin \left(\vec{k} \cdot \vec{r} \right) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}},$$

$$P_{-}(\mathbf{r}) = Ar^{2} \left(1 - \frac{\sin 2kr}{2kr} \right)$$



说明:对称空间波函数 → 两粒子靠近的几率增大,

反对称空间波函数 → 两粒子靠近的几率减小,

似乎在全同粒子间存在一种作用力, 玻色子是吸引力, 费米子是排斥力。这种力称为交换力, 它不是一种真正意义上的力, 无施力者, 在 $\Gamma \rightarrow \infty$ 时, 交换力消失。

全同粒子系统的量子特性

全同玻色子系统在低温下呈现超流效应-具有量子特性的宏观物体(玻色-爱因斯坦凝聚)

全同费米子系统在低温下呈现超导效应-电子之间两两结成库派对(复合玻色子)

Pauli不相容原理使全同费米子体系无法聚集-导致日常桌椅板凳等物体占有的空间尺度

电子在白矮星内部提供简并压力抵抗重力崩塌,但当其质量大于1.4倍太阳质量时电子被压入质子内部形成中子星,中子星内部压强改由中子的简并提供

量子力学的基本公设

公设1: 微观体系的状态由波函数描述,波函数满足单值、有限、连续条件

公设2: 波函数的动力学演化满足薛定鄂方程

公设3: 力学量用厄密算符表示,且有组成完备集的本征函数系

公设4: 任一波函数可以展开为力学量算符本征函数的线性叠加,测得力学量为本征值 λ_n 的几率为展开式中对应本征函数系数的模方 $|c_n|^2$

公设5: 全同粒子相互调换不改变体系状态