

第 8 章 全同粒子



17 世纪末最有才气的莱布尼茨 (Gottfried Wilhelm Leibniz) 在普鲁士王宫里向王室成员和众多贵族宣传他的宇宙观时提出：“凡物莫不相异”——“天地间没有两个彼此完全相同的树叶”。诚然，经典物理的所有物体都是可以区分的。在经典物理中，“空间”是物理对象“位置”的自然沿拓，空间是由占据它的粒子来定义的。因为粒子（或质点）具有不可入性，即在同一时刻两个物理对象无法占据同一空间位置 \vec{r} ，所以原则上我们可以根据物理对象的空间位置来区分它们。然而量子力学中“轨道”没有物理意义，由于不确定关系，在给定时刻描述粒子的空间分布的波函数要涵盖整个坐标空间，此时我们需要讨论物理对象的量子状态。波函数遵从态叠加原理，然而对于多粒子体系，态叠加原理并没有要求两个粒子出现在空间同一点的几率密度为零。下面我们将讨论：“两个物体是否可以在同一时刻处于同一状态？”

在量子力学中，这个问题变得更加重要，量子化将导致全同粒子——定义为所有物理属性（质量、电荷、自旋等）完全相同的粒子。例如

$$\begin{aligned} \text{自旋 } (s): & 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \\ \text{电荷 } (e): & \pm 1, \pm 2, \pm \frac{2}{3}, \pm \frac{1}{3}, \dots \\ \text{弱荷 } (I): & \pm \frac{1}{2} \\ \text{质量 } (M): & m_e, m_p, \dots \end{aligned}$$

宇宙中所有电子的质量、自旋和电荷等诸般属性完全相同。此时上面的问题化作：“量子力学中内禀属性完全相同的粒子是否可以处于相同状态？”这就是我们下面要讨论的物理学中最简单也是最深刻的原理——泡利不相容原理。

8.1 全同粒子的不可区分性

在经典物理中我们可以同时测量两个粒子的位置，所以我们可以跟踪两个粒子的轨迹来区分粒子 1 和粒子 2。例如，在斯诺克比赛中，只要摄影机的分辨率足够精确，我们就可以分辨 15 个红球。故而，无论两个经典粒子如何相似，它们都是可以分辨的。在宏观尺度上，全同只不过是一个抽象的概念而已。在量子力学中，当两个粒子的波函数具有重叠时，虽然我们可以在每一个时刻都可以用 1 和 2 来标记两个粒子，但我们无法知道下一时刻它们的轨道信息，所以我们无法跟踪这两个粒子。如图 (8.1) 所示，在两粒子的德布罗意波重叠区域，我们无法区分左面图形和右面图形。

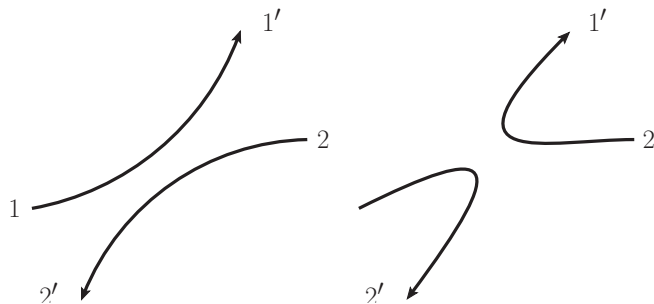


图 8.1: 双粒子散射过程

当然，如果两个粒子间距远大于它们各自的德布罗意波长，例如位于北京的电子和纽约的电子，虽然它们的内禀属性相同，但我们可以根据它们的空间位置来标记它们。

下面我们用一维谐振子势中运动的两个全同粒子为例说明量子理论预言的不确定性。为简单起见，我们假设这两个粒子之间没有相互作用。描述此双粒子体系的哈密顿算符为

$$\hat{H} = \hat{h}^{(1)} + \hat{h}^{(2)} \equiv \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}_1^2 + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}_2^2, \quad (8.1.1)$$

其中 $\hat{h}^{(1)}$ 和 $\hat{h}^{(2)}$ 分别表示谐振子势中单粒子的哈密顿算符，令其能量本征值和本征函数为 ε_n 和 ϕ_n ，满足

$$\hat{h}\phi_n(x) = \varepsilon_n(x)\phi_n(x) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\phi_n(x). \quad (8.1.2)$$

$\hat{h}^{(1,2)}$ 的上标为粒子标号。当两粒子都处于基态时，体系能量为 $E_0 = \hbar\omega$ ，波函数为

$$\Phi_0(x_1, x_2) = \phi_0(x_1)\phi_0(x_2). \quad (8.1.3)$$

当两粒子体系处于第一激发态时， $E_1 = 2\hbar\omega$ ，但波函数存在简并，有两种不同的形式

$$\phi_1(x_1)\phi_0(x_2) \text{ 或 } \phi_0(x_1)\phi_1(x_2). \quad (8.1.4)$$

如果没有可观测物理量能够区分此两种波函数组会，那么它们就是完全等价的。因为绝对相位没有任何物理意义，就有相对相位才是可观测的，所以我们总可以通过一个相位旋转将两个等价的波函数联系起来。然而，如果存在某个物理量可以区分这两种不同的波函数组合，此两种波函数组会就不再等价。而态叠加原理告诉我们，这两种波函数组会的任意线性组合仍然是描述物理体系的波函数，

$$\Phi(x_1, x_2) = \lambda\phi_1(x_1)\phi_0(x_2) + \mu\phi_0(x_1)\phi_1(x_2), \quad (8.1.5)$$

此时存在多个态函数对应于同一个物理状态，所以我们无法确定何种线性组会形式才是描述物理体系的正确形式，到目前我们所谈及的量子力学原理或公设是无法确定这种理论上的不确定性。

考虑在 $\Phi_1(x_1, x_2)$ 波函数中测量两粒子的坐标位置 $\hat{x}_1 \otimes \hat{x}_2$,

$$\langle \hat{x}_1 \otimes \hat{x}_2 \rangle$$



$$\begin{aligned}
&= \langle \lambda \phi_1(x_1) \phi_0(x_2) + \mu \phi_0(x_1) \phi_1(x_2) | \hat{x}_1 \hat{x}_2 | \lambda \phi_1(x_1) \phi_0(x_2) + \mu \phi_0(x_1) \phi_1(x_2) \rangle \\
&= \langle \lambda \phi_1(x_1) \phi_0(x_2) | \hat{x}_1 \hat{x}_2 | \lambda \phi_1(x_1) \phi_0(x_2) \rangle + \langle \mu \phi_0(x_1) \phi_1(x_2) | \hat{x}_1 \hat{x}_2 | \mu \phi_0(x_1) \phi_1(x_2) \rangle \\
&+ \langle \lambda \phi_1(x_1) \phi_0(x_2) | \hat{x}_1 \hat{x}_2 | \mu \phi_0(x_1) \phi_1(x_2) \rangle + \langle \mu \phi_0(x_1) \phi_1(x_2) | \hat{x}_1 \hat{x}_2 | \lambda \phi_1(x_1) \phi_0(x_2) \rangle \\
&= \lambda^* \mu \langle \phi_1(x_1) | \hat{x}_1 | \phi_0(x_1) \rangle \langle \phi_0(x_2) | \hat{x}_2 | \phi_1(x_2) \rangle + \lambda \mu^* \langle \phi_0(x_1) | \hat{x}_1 | \phi_1(x_1) \rangle \langle \phi_1(x_2) | \hat{x}_2 | \phi_0(x_2) \rangle.
\end{aligned}$$

利用迭推关系

$$\hat{x} \phi_n(x) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n} \phi_{n-1} + \sqrt{n+1} \phi_{n+1}) \quad (8.1.6)$$

可得

$$\langle \hat{x}_1 \otimes \hat{x}_2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (\lambda^* \mu + \lambda \mu^*) = \frac{\hbar}{m\omega} \Re(\lambda^* \mu). \quad (8.1.7)$$

两粒子平均值依赖于 λ 和 μ ，但整个理论没有提供关于 λ 和 μ 的任何信息。理论具有不确定性或不完备，我们只有在固定 λ 和 μ 之后才可以做理论预言。非常幸运的是，自然界仅仅允许 $\lambda = \pm\mu$ ，这里正负号取决于粒子的属性。

8.2 交换算符和交换不变性

为了描述两粒子体系，即使它们是不可区分的全同粒子，我们仍然需要对粒子进行编号，例如称之为粒子 1 和粒子 2。当然这个编号没有任何物理意义，任何可观测物理量都不应该依赖于粒子编号。此双粒子体系的希尔伯特空间是 $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ 。定义 $\{|k\rangle\}$ 为 \mathcal{H}_1 空间基矢， $\{|n\rangle\}$ 是 \mathcal{H}_2 空间基矢，所以两粒子波函数是

$$|\psi\rangle = \sum_{k,n} C_{k,n} |k\rangle \otimes |n\rangle \equiv \sum_{k,n} C_{k,n} |1:k;2:n\rangle. \quad (8.2.1)$$

因为全同粒子的编号没有任何意义，所以全同粒子体系具有编号交换对称性。定义交换算符 \hat{P}_{12} ，它作用在全同粒子体系波函数上会将粒子编号 1 和 2 交换 ($1 \leftrightarrow 2$)

$$\hat{P}_{12} |1:k;2:n\rangle = |2:k;1:n\rangle. \quad (8.2.2)$$

因为交换两次之后全同粒子体系不变，所以任何实验结果都不依赖于具体粒子编号，所以交换操作后的波函数应该和交换之前波函数等价，最多仅仅差一个相位因子，

$$|2:k;1:n\rangle = e^{i\delta} |1:k;2:n\rangle. \quad (8.2.3)$$

态叠加原理要求这个相位因子和具体波函数无关，所以对物理体系进行两次连续 \hat{P}_{12} 操作后就会回到物理体系原始状态，即

$$\hat{P}_{12}^2 = \hat{I} \implies e^{2i\delta} = 1 \implies e^{i\delta} = \pm 1. \quad (8.2.4)$$

故而， \hat{P}_{12} 的本征值为 ± 1 ($\lambda = \pm\mu$)

$$\hat{P}_{12} |1:k;2:n\rangle = \pm |1:k;2:n\rangle. \quad (8.2.5)$$



如果初始时刻全同粒子体系处于 \hat{P}_{12} 的本征态, 那么在之后的任何时刻全同粒子体系是否还是交换算符的本征态? 下面我们验证交换算符是一个运动常数。证明:

$$\begin{aligned} \hat{P}_{12}\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_2, t) &= \hat{H}(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t)\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_2, t) = \hat{H}(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t)\hat{P}_{12}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \\ \implies \hat{P}_{12}\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) &= \hat{H}(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t)\hat{P}_{12}. \end{aligned} \quad (8.2.6)$$

因为 $\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \hat{H}(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t)$, 所以

$$[\hat{P}_{12}, \hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)] = 0. \quad (8.2.7)$$

故而, 交换算符是运动常数。这意味着在初始时刻进行置换操作等价于物理体系随时间演化到 t 时刻再进行置换操作。这二者给出相同物理结果。此外, 在初始时刻全同粒子构成的物理体系处于某个交换对称态, 那么之后任何时刻此物理体系都将处于此交换对称态中——量子动力学遵从全同原理。

因为 $\hat{P}_{12}|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle$ 并且 $[\hat{P}_{12}, \hat{H}] = 0$, 所以对于含有两个全同粒子的系统, 当交换两全同粒子时, 系统的波函数是对称的或反对称的, 即

$$|\psi\rangle = \sum_{k,n} C_{k,n}|1:k;2:n\rangle, \quad C_{k,n} = \pm C_{n,k}. \quad (8.2.8)$$

对称波函数为

$$\begin{aligned} |\psi_S\rangle &\propto \sum_{k,n} C_{k,n}(|1:k;2:n\rangle + |2:k;1:n\rangle), \\ \hat{P}_{12}|\psi_S\rangle &= |\psi_S\rangle. \end{aligned} \quad (8.2.9)$$

反对称波函数为

$$\begin{aligned} |\psi_A\rangle &\propto \sum_{k,n} C_{k,n}(|1:k;2:n\rangle - |2:k;1:n\rangle), \\ \hat{P}_{12}|\psi_A\rangle &= -|\psi_A\rangle. \end{aligned} \quad (8.2.10)$$

8.3 泡利不相容原理

如果在一个实验中测得某粒子在置换操作下波函数为对称的, 那么该粒子是否可以在其他实验中取反对称的波函数? 如果不能, 那么是什么决定该粒子波函数的对称性质? 答案就是著名的泡利不相容原理。

为了解释原子周期结构, 泡利提出“不相容原理”——物理学中最简单、最基本的物理规律: “没有两个电子可以占据同一个量子态”。虽然泡利本人也没有想到他提出的这个原理对物理学的影响是如此深远。通常人们认为泡利原理为理解原子结构和元素周期表提供了必不可少的理论基础, 然而泡利原理最重要的是指出自然界中存在



Theorem 8.1

自然届中所有粒子都可以归于如下两类粒子：

- (1) 自旋为整数的玻色子，其波函数在 \hat{P}_{12} 作用下是对称的；
- (2) 自旋为半整数的费米子，其波函数在 \hat{P}_{12} 作用下是反对称的。

两种统计性质完全不同的粒子——费米子和玻色子。当泡利在早期量子论的框架下提出的不相容原理后不久，海森堡、费米和狄拉克从波函数的反对称性重新阐述了泡利不相容原理，费米和狄拉克进而给出了更一般的形式。

考虑一个两个全同粒子构成的系统。忽略两者之间的相互作用，则此两粒子系统的哈密顿算符为

$$\hat{H} = \hat{h}(q_1) + \hat{h}(q_2), \quad (8.3.1)$$

其中 $\hat{h}(q_1)$ 表示单粒子哈密顿算符（设 $\hat{h}(q_1)$ 和 $\hat{h}(q_2)$ 形式完全相同），

$$\hat{h}(q)\phi_k(q) = \epsilon_k\phi_k(q) \quad k \text{ 代表一组完备的量子数。} \quad (8.3.2)$$

设一个粒子处于 ϕ_{k_1} 而另一个粒子处于 ϕ_{k_2} ，则 $\phi_{k_1}(q_1)\phi_{k_2}(q_2)$ 和 $\phi_{k_1}(q_2)\phi_{k_2}(q_1)$ 两种波函数组会都对应于能量 $\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2}$ 。下面分别考虑玻色子和费米子的波函数。

(a) 玻色子情况：波函数是对称的 (symmetric)

(1) $k_1 \neq k_2$ 时：

$$\begin{aligned} \psi_{k_1 k_2}^{(S)}(q_1, q_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{k_1}(q_1)\phi_{k_2}(q_2) + \phi_{k_1}(q_2)\phi_{k_2}(q_1)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + \hat{P}_{12})\phi_{k_1}(q_1)\phi_{k_2}(q_2). \end{aligned} \quad (8.3.3)$$

(2) $k_1 = k_2 = k$ 时：

$$\phi_{kk}^{(S)}(q_1, q_2) = \phi_k(q_1)\phi_k(q_2). \quad (8.3.4)$$

(b) 费米子情况：波函数是反对称的 (antisymmetric)

$$\begin{aligned} \psi_{k_1 k_2}^{(A)}(q_1, q_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{k_1}(q_1)\phi_{k_2}(q_2) - \phi_{k_1}(q_2)\phi_{k_2}(q_1)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_{k_1}(q_1) & \phi_{k_1}(q_2) \\ \phi_{k_2}(q_1) & \phi_{k_2}(q_2) \end{vmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (1 - \hat{P}_{12})\phi_{k_1}(q_1)\phi_{k_2}(q_2). \end{aligned} \quad (8.3.5)$$

当 $k_1 = k_2 = k$ 时， $\psi_{kk}^{(A)} = 0$ 。这就是泡利不相容原理——不允许两个全同的费米子处于同一单粒子态 $|\phi_k\rangle$ 上，这里 k 代表足以描述费米子体系的一组完备量子数。如果在实验中我们发现全同费米子处于同一个单粒子态中，那就意味着我们已知的量子数集合并不是完备的，一定存在着未知的力学量自由度。



8.4 示例

考虑两个全同自由粒子，令其动量分别为 $\hbar\vec{k}_\alpha$ 和 $\hbar\vec{k}_\beta$ 。下面分三种情况讨论它们在空间的相对距离的几率分布。我们更关心的是两粒子体系的相对位置分布。将两体问题化简为整体位置和相对位置，略去质心运动部分，相对运动的波函数为

$$\phi_k(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \quad (8.4.1)$$

- (a) 没有交换对称性（相当于非全同粒子）：在不计及交换对称性时，两粒子相对运动的波函数就是 $\phi_k(\vec{r})$ 。此时在一个粒子周围，半径在 $(r, r+dr)$ 的球壳内找到另一个粒子的几率为

$$r^2 dr \int |\phi_k(\vec{r})|^2 d\Omega = \frac{4\pi r^2 dr}{(2\pi\hbar)^3} = 4\pi r^2 P(r) dr. \quad (8.4.2)$$

式中 $P(r)$ 表示几率密度。从上式中看出 $P(r)$ 是个常数。这完全符合无相互作用的两个自由粒子的物理图像，每个粒子的波函数覆盖全空间而且出现在不同位置的几率均等。

- (b) 交换反对称：当粒子 $1 \leftrightarrow 2$ 交换时， $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ ，反对称波函数为

$$\phi_k^{(A)}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \hat{P}_{12}) \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \frac{i\sqrt{2}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \sin(\vec{k}\cdot\vec{r}), \quad (8.4.3)$$

由此计算可得

$$\begin{aligned} 4\pi r^2 P^{(A)}(r) dr &= r^2 dr \int |\phi_k^{(A)}(r)|^2 d\Omega = \frac{2r^2 dr}{(2\pi\hbar)^3} \int \sin^2(\vec{k}\cdot\vec{r}) d\Omega \\ &= \frac{2r^2 dr}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin^2(kr \cos\theta) \sin\theta d\theta \\ &= \frac{4\pi r^2 dr}{(2\pi\hbar)^3} \left[1 - \frac{\sin(2kr)}{2kr} \right], \end{aligned} \quad (8.4.4)$$

即

$$P^{(A)}(r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \left[1 - \frac{\sin(2kr)}{2kr} \right]. \quad (8.4.5)$$

- (c) 交换对称：类似可以求出

$$P_k^{(s)}(r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \left[1 + \frac{\sin(2kr)}{2kr} \right]. \quad (8.4.6)$$

在空间波函数交换对称的情况下，两个粒子靠拢的几率是最大，而交换反对称时，两个粒子靠近 ($r \rightarrow 0$) 的几率趋于零。但当 $r \rightarrow \infty$ 时，三种情况没有什么区别， $P(r)/(2\phi\hbar)^3 \rightarrow 1$ 。此时，波函数交换对称性的影响逐渐消失，因为此时两个粒子分开足够远，我们可以用它们的位置来区分它们了。

