第六章知识点梳理和典型例题

内部资料请勿外传，有任何问题和建议请联系

pb161462@mail.ustc.edu.cn, dinggj@ustc.edu.cn

一、基本概念和基本规律

（1）粒子运动状态的描述

➢ 经典描述：

① 粒子的自由度数：能够完全确定质点空间位置的独立坐标数目。自由度为 r 的一个微观粒子的微观运动状态由 r 个广义坐标和 r 个广义动量确定。

② μ 空间：用单粒子的广义坐标 $q_1,q_2,q_3,\cdots,q_r$ 和广义动量 $p_1,p_2,p_3,\cdots,p_r$ 为直角坐标构成的 $2r$ 维空间。μ空间中的一个点表示粒子的一个运动状态。

➢ 量子描述：

① 一切微观粒子都具有波粒二象性（波粒二象性），微观粒子的坐 标和动量不可能同时具有确定的值（测不准原理）。微观粒子的运动状态用波函数描述。

② 微观粒子的运动状态称为量子态。它由一组量子数来表征，状态所对应的力学量(如能量等)**不连续（状态量子化）**。

③ 微观粒子的能量是不连续的,分立的能量称为**能级**。如果一个能级的量子态不止一个，该能级就称为**简并**的。一个能级的量子态数称为该能级的**简并度**。

④ **全同粒子不可分辨**：任意交换一对粒子不改变系统状态。

（2）相格：由不确定关系 $\Delta q \Delta p \approx h$ 可知，如果用坐标和动量来描述微观粒子的运动，一个状态对应于 μ 空间中的一个体积，称为一个**相格**。如果粒子的自由度为 r，相格的大小为 $\Delta q_1 \cdots \Delta q_r \Delta p_1 \cdots \Delta p_r \approx h^r$。**在能级准连续的条件下**，$\mu$ 空间中的体积元中 $d\omega = dq_1 dq_2 \cdots dq_r dp_1 dp_2 \cdots dp_r$ 包含的量子态数等于

$$\frac{d\omega}{h^r} = \frac{dq_1 dq_2 \cdots dq_r dp_1 dp_2 \cdots dp_r}{h^r}$$

（3）态密度：表示能量在 ε 附近单位能量间隔内的状态数，通常记作 $D(\varepsilon)$。对于非相对论粒子，平动能级的态密度是

$$D(\varepsilon)d\varepsilon = g\frac{2\pi V}{h^3}(2m)^{3/2}\varepsilon^{1/2}d\varepsilon$$

这里 g 是由于自旋的内禀自由度，对于电子和光子，$g=2$。

（建议熟练掌握态密度的计算和推理，相关习题：教材习题 6.1，6.2，6.3，6.4 以及补充习题 1.1）

（4）全同粒子：具有完全相同属性（相同的质量、自旋、电荷等）的同类粒子。

（5）近独立粒子系统：粒子之间的相互作用很弱，因而可以忽略粒子之间的相互作用，整个系统的能量可表达为组成系统的所有单粒子的能量之和。（如理想气体：近独立的粒子组成的系统）

（6）近独立粒子系统微观状态的描述

- 全同定域子系统：确定每一粒子的量子态
- 全同非定域子系统：确定处在每个单粒子量子态上的粒子数

（7）玻色子和费米子

- 玻色子：自旋为整数的粒子。

- 费米子：自旋为半整数的粒子。
- 泡利不相容原理：不允许有两个全同的费米子处于同一个单粒子量子态。
- 全同性原理要求：交换任何两个粒子的全部坐标（包括位置和自旋）时系统的波函数只允许两种情况：玻色子系统的波函数不变（波函数是对称的）；费米子系统的波函数反号（波函数是反对称的）。

（8）玻耳兹曼系统、玻色系统、费米系统

- 玻耳兹曼系统：由可分辨的全同近独立粒子组成，例如：定域子系统是玻耳兹曼系统。其特点是：处在每个个体量子态上的粒子数不受限制；粒子可分辨，即经典情形。
- 玻色系统：不可分辨的全同近独立的玻色粒子组成，例如：光子气体。 其特点是：不受泡利不相容原理的约束，即处在同一个个体量子态上的粒子数不受限制。
- 费米系统：不可分辨的全同近独立的费米粒子组成，例如：电子气体。 其特点是：受泡利不相容原理的约束，即处在同一个个体量子态上的粒子数最多只能为 1 个粒子。

（9）等概率原理：对于处在平衡状态的孤立系统，系统各个可能的微观状态出现的几率是相等的。

（10）分布：每一个单粒子能级上的粒子数

能级：ε_1，ε_2，$\cdots$，ε_l，$\cdots$

简并度：ω_1，ω_2，$\cdots$，ω_l，$\cdots$

粒子数：a_1，a_2，$\cdots$，a_l，$\cdots$

把数列$\{a_l\}$称为一个分布。

（11）给定分布的微观状态数

- 玻尔兹曼系统：$\Omega_{MB}=\dfrac{N!}{\prod_l a_l!}\prod_l \omega_l^{a_l}$
- 玻色系统：$\Omega_{BE}=\prod_l \dfrac{(\omega_l+a_l-1)!}{a_l!(\omega_l-1)!}$
- 费米系统：$\Omega_{FD}=\prod_l \dfrac{\omega_l!}{a_l!(\omega_l-a_l)!}$

（12）三种最概然分布

根据等概率原理，对于处在平衡状态的孤立系统，系统各个可能的微观状态出现的概率是相等的，那么微观状态数最多的分布，出现的概率最大，称为**最可几分布（最概然分布）**。

- 玻尔兹曼分布：$a_l=\omega_l e^{-\alpha-\beta\varepsilon_l}$
- 玻色分布：$a_l=\dfrac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l}-1}$
- 费米分布：$a_l=\dfrac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l}+1}$

相关习题：教材习题 6.5，6.6

（13）经典极限条件：$e^{\alpha}>>1$ 或者等价地$a_l<<\omega_l$

满足经典极限条件的玻色和费米系统遵从与玻耳兹曼系统同样的分布，虽然它们的微观状态数是不同的。

$$e^{\alpha}>>1:\quad a_l=\frac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l}\mp 1}\approx\omega_l e^{-\alpha-\beta\varepsilon_l},\quad \Omega_{BE}\approx\Omega_{FD}\approx\frac{\Omega_{MB}}{N!}$$

因子$N!$来自全同性原理。

二、典型例题

例题 1：（1）求非相对论情形的态密度；

（2）求极端相对论情形的态密度。

解：

$$\mathrm{d}n_x\mathrm{d}n_v\mathrm{d}n_z=\left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z=\frac{V}{h^3}\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z$$

取球坐标，则

$$\mathrm{d}p_x\,\mathrm{d}p_y\,\mathrm{d}p_z=p^2\sin\theta\,\mathrm{d}p\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi$$

（1）

$$p=(2m\varepsilon)^{1/2},\quad \mathrm{d}p=\left(\frac{m}{2\varepsilon}\right)^{1/2}\mathrm{d}\varepsilon$$

$$\mathrm{d}n_x\mathrm{d}n_v\mathrm{d}n_z=\frac{V}{h^3}2m\varepsilon\left(\frac{m}{2\varepsilon}\right)^{1/2}\mathrm{d}\varepsilon\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi=\frac{V}{h^3}m^{3/2}(2\varepsilon)^{1/2}\,\mathrm{d}\varepsilon\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi$$

$$D(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon=\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\frac{V}{h^3}m^{3/2}(2\varepsilon)^{1/2}\,\mathrm{d}\varepsilon\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi=\frac{2\pi V}{h^3}(2m)^{3/2}\varepsilon^{1/2}\,\mathrm{d}\varepsilon$$

（2）

$$\begin{aligned}\mathrm{d}n_x\,\mathrm{d}n_y\,\mathrm{d}n_z&=\frac{V}{h^3}p^2\sin\theta\,\mathrm{d}p\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi\\&=\frac{V}{c^2h^3}\varepsilon^2\sin\theta\frac{1}{c}\,\mathrm{d}\varepsilon\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi\\&=\frac{V}{c^3h^3}\varepsilon^2\sin\theta\,\mathrm{d}\varepsilon\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi\end{aligned}$$

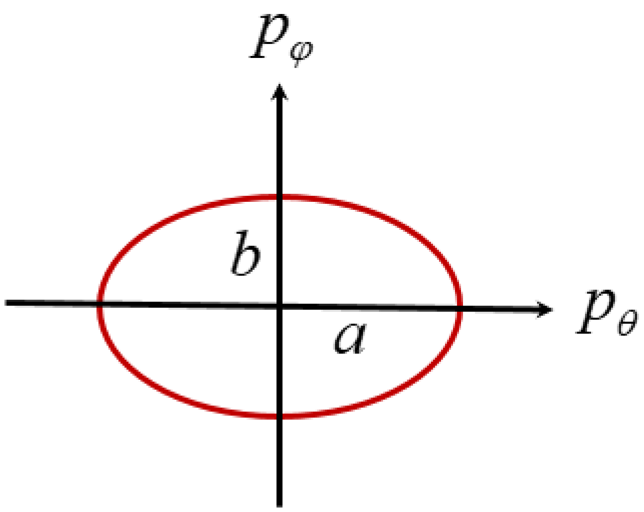
$$D(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon=\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\frac{V}{c^3h^3}\varepsilon^2\sin\theta\,\mathrm{d}\varepsilon\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi=\frac{4\pi V}{c^3h^3}\varepsilon^2\,\mathrm{d}\varepsilon$$

例题 2：哑铃型的双原子分子绕其质心转动可视为一个转子，其哈密顿量可表示为$H=\frac{1}{2I}(p_\theta^2+\frac{1}{\sin^2\theta}p_\varphi^2)$。式中广义坐标$\theta$和$\varphi$是用来确定子

位置的转轴在空间中的两个方位角，p_θ 和 p_φ 是相应的广义动量，I 为转子的转动惯量，试求态密度。

解：试在以广义坐标 p_θ 和 p_φ 坐标轴的动量空间中，转子的等能面是椭圆。如下图所示，椭圆的半长轴和半短轴分别是

$$a=\sqrt{2I\varepsilon},\quad b=\sqrt{2I\varepsilon}\sin\theta$$



因此，能量为 ε 的等能面所包围的相体积为

$$\begin{aligned}\omega(\varepsilon)&=\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}d\theta\iint_{H\le\varepsilon}dp_\theta dp_\varphi\\&=\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}d\theta\iint_{H\le\varepsilon}\left[\pi\sqrt{2I\varepsilon}\sqrt{2I\varepsilon}\sin\theta\right]\\&=2\pi I\varepsilon\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\\&=8\pi^2I\varepsilon\end{aligned}$$

所以在能量间隔 $\varepsilon\sim\varepsilon+d\varepsilon$ 内的转子运动状态数为

$$D(\varepsilon)d\varepsilon=\frac{d\omega}{h^2}=\frac{8\pi^2I}{h^2}d\varepsilon$$

故态密度 $D(\varepsilon)$ 为

$$D(\varepsilon)=\frac{8\pi^2 I}{h^2}$$

例题 3：二维谐振子的能量可表示为

$$\varepsilon=\frac{p_x^2+p_y^2}{2m}+\frac{k(x^2+y^2)}{2}$$

试求态密度 $D(\varepsilon)$。

解：由题设可知，能量为 ε 的等能面满足

$$\frac{p_x^2}{2m\varepsilon}+\frac{p_y^2}{2m\varepsilon}+\frac{x^2}{2\varepsilon/k}+\frac{y^2}{2\varepsilon/k}=1$$

重新定义无量纲变量

$$\xi_x=\frac{p_x}{\sqrt{2m\varepsilon}},\quad \xi_y=\frac{p_y}{\sqrt{2m\varepsilon}},\quad \eta_x=\frac{x}{\sqrt{2\varepsilon/k}},\quad \eta_y=\frac{y}{\sqrt{2\varepsilon/k}}$$

则能量为 ε 的等能面方程可写成

$$\xi_x^2+\xi_y^2+\eta_x^2+\eta_y^2=1$$

这是 4 维空间中，半径为 1 的球面。相应的相体积为

$$\omega(\varepsilon)=\sqrt{2m\varepsilon}\sqrt{2m\varepsilon}\sqrt{2\varepsilon/k}\sqrt{2\varepsilon/k}K_4=\frac{4m\varepsilon^2}{k}K_4$$

这里 K_4 表示 4 维空间中半径为 1 的球体积。由 n 维空间中半径为 1 的球体积 $K_n=\frac{\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2+1)}$ 可得 $K_4=\frac{\pi^2}{2}$，所以相体积为

$$\omega(\varepsilon)=\frac{4m\varepsilon^2}{k}\frac{\pi^2}{2}=\frac{2\pi^2 m\varepsilon^2}{k}$$

所以在能量间隔 $\varepsilon\sim\varepsilon+d\varepsilon$ 内二维谐振子的运动状态数为

$$D(\varepsilon)d\varepsilon=\frac{d\omega}{h^2}=\frac{4\pi^2 m\varepsilon}{kh^2}d\varepsilon$$

故态密度 $D(\varepsilon)$ 为

$$D(\varepsilon)=\frac{4\pi^2 m\varepsilon}{kh^2}$$

例题 4：各向异性振子存在简并能级吗？如果有，求二维各向异性振子的简并能级和简并度。

解：二维谐振子量子化的能量为

$$\varepsilon=\left(n_x+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_x+\left(n_y+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_y$$

首先考虑如果 x 方向和 y 方向的频率之比是有理数，即

$$\frac{\omega_x}{\omega_y}=\frac{m_x}{m_y}$$

这里 m_x 和 m_y 是没有公因子的互质整数, 我们可令

$$\omega_x = m_x\omega,\quad \omega_y = m_y\omega$$

其中 ω 是正数。则谐振子能量可表达成

$$\varepsilon=\varepsilon_0+(n_x m_x+n_y m_y)\hbar\omega,\quad \varepsilon_0=(\omega_x+\omega_y)\hbar/2$$

此外，我们记作

$$n_x\div m_y=i_x\cdots\cdots j_x,\quad i_x=0,1,2\cdots,\quad 1\le j_x<m_y$$
$$n_y\div m_x=i_y\cdots\cdots j_y,\quad i_y=0,1,2\cdots,\quad 1\le j_y<m_x$$

所以谐振子能量可进一步化简成为

$$\varepsilon=\varepsilon_0+(m_x j_x+m_y j_y)\omega+(i_x+i_y)\,m_x m_y\omega$$

所以单粒子能级具有简并度

$$g(n_x,n_y)=i_x+i_y+1$$

接着考虑 x 方向和 y 方向的频率之比 ω_x/ω_y 是无理数的情形，如果存在能级简并，则

$$\varepsilon(n_1,n_2)=\varepsilon_0+(n_x\omega_x+n_y\omega_y)\hbar=\varepsilon(n_x',n_y')=\varepsilon_0+(n_x'\omega_x+n_y'\omega_y)\hbar$$

那么可得

$$n_x\omega_x + n_y\omega_y = n'_x\omega_x + n'_y\omega_y \Rightarrow \frac{\omega_x}{\omega_y} = \frac{n_y - n'_y}{n'_x - n_x}$$

这与假设的ω_x/ω_y是无理数矛盾。所以如果两个方向的频率比ω_x/ω_y为有理数，则存在能级简并，否则能级不简并。

例题 5：设系统由 2 个粒子组成，粒子的个体量子态有 3 个，如果这两个粒子分属玻耳兹曼系统、玻色系统、费米系统时，试分别讨论系统各有那些可能的微观状态？

解：对于玻尔兹曼系统（定域系统）可有 9 种不同的微观状态：

	量子态 1	量子态 2	量子态 3
1	AB		
2		AB	
3			AB
4	A	B	
5	B	A	
6		A	B
7		B	A
8	A		B
9	B		A

对于玻色系统，可以有 6 种不同的微观状态。

	量子态 1	量子态 2	量子态 3
1	AA		
2		AA	
3			AA
4	A	A	
5		A	A
6	A		A

对于费米系统，可以有 3 个不同的微观状态。

	量子态 1	量子态 2	量子态 3
1	A	A	
2		A	A
3	A		A