

Image

量子统计力学笔记

作者：梁莫言

清华大学

时间：February 7, 2026

目录

第 1 章	量子多体问题和二次量子化	1
1.1	量子多体问题的表述	1
1.2	二次量子化和 Fock 空间	1

第 1 章 量子多体问题和二次量子化

1

量子统计力学所研究的问题是大量服从 Schrodinger 方程的粒子的平衡态统计行为。对于经典粒子来说，在粒子数变多时，解出这些粒子所服从的 Hamilton 方程已经不可能，找出满足它们的初值条件的特解更是不可能。在量子的情形下，要考虑这些粒子的相互作用下再解出 Schrodinger 方程，为人来说已经不可能。但是，粒子的大量性可以使我们做出一些遍历性的假设，进而发现这些粒子所满足的统计规律。

2

3

4

5

6

1.1 量子多体问题的表述

7

一个量子多体问题本质上是一个 Schrodinger 方程的求解问题：

8

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H}(\hat{q}_1, \hat{p}_1, \dots, \hat{q}_n, \hat{p}_n) \Psi = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + U(\hat{q}_i, t) \right) \Psi + V_{int}(\hat{q}_1, \dots, \hat{q}_n) \Psi. \quad (1.1)$$

9

在量子统计物理中，我们大多研究的是全同粒子的统计问题。因此，在 (1.1) 中首先有

10

$$m_i = m \quad (i = 1, 2, \dots, n).$$

11

其次，粒子间的相互作用项形如：

12

$$\hat{V}_{int} = \frac{1}{2!} \sum_{i \neq j} \hat{V}_2(\hat{q}_i, \hat{q}_j, t) + \frac{1}{3!} \sum_{i \neq j \neq k} \hat{V}_3(\hat{q}_i, \hat{q}_j, \hat{q}_k, t) + \dots$$

13

粒子的全同性首先表现在 Hamilton 量上：当对于上面写出的哈密顿量 H 实行变换

14

$$(\hat{q}_i, \hat{p}_i) \leftrightarrow (\hat{q}_j, \hat{p}_j)$$

15

时，哈密顿量的形式不变。这要求对于每一个相互作用势能项对于坐标 $\{\hat{q}_i\}$ 的置换保持不变——这是符合直觉的。于是，我们由于 Hamilton 量具有这样的对称性，自然想到波函数具有这样的对称性：也就是对于坐标与动量的对换 $(\hat{q}_i, \hat{p}_i) \leftrightarrow (\hat{q}_j, \hat{p}_j)$ ，在坐标表象下成立

16

17

18

$$\Psi(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_i, \dots, \vec{q}_j, \dots, \vec{q}_n) = e^{i\alpha} \Psi(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_j, \dots, \vec{q}_i, \dots, \vec{q}_n). \quad (1.2)$$

19

其中考虑到了波函数模方的不变性。这个式子的物理意义是：粒子的交换不带来物理态的改变，或粒子的分辨在物理上是不可能的。两种自然的情况是 $\alpha = 0$ 和 $\alpha = \pi$ ，在这些情况下粒子分别被称为满足 Bose 统计与 Fermi 统计。

20

21

22

1.2 二次量子化和 Fock 空间

23

我们只考虑一个粒子的情形，这时 Hamilton 量是：

24

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{q}, t)$$

25

我们由 Schrodinger 方程可以解出一组完备的解 $\{\psi_s(\vec{q})\}$ ，其中 s 是某些量子数。这些波函数张成波函数 Hilbert 空间 $L^2(\mathbb{R})$ 的一组基底，因此任何函数可用这一组本征函数展开。

26

27

于是我们现在可以构造多粒子波函数的空间，它是 n 个粒子的 **直积空间**。直觉上它的基底是形如

$$\psi_{s_1}(\vec{q}_1) \otimes \psi_{s_2}(\vec{q}_2) \otimes \cdots \otimes \psi_{s_n}(\vec{q}_n)$$

的向量。然而，我们发现这样的选择不是物理的：因为它们并不能反映出粒子的全同性。事实上，服从 **Fermi** 统计的波函数与服从 **Bose** 统计的波函数构成这个直积空间的两个无穷维子空间（这可以由 (1.2) 得到，只需要注意到（反）对称波函数的线性组合还是（反）对称波函数），张成它们的基底才是我们关心的对象。

我们现在实行一种 **对称化** 与 **反对称化** 操作，这样它们便可以张成对应的子空间。利用置换，我们可以写：

$$\Psi_B(s_1, s_2, \cdots, s_n) [\vec{q}_1, \cdots, \vec{q}_n] = N \sum_{\pi \in S_n} \bigotimes_{i=1}^n \psi_{s_{\pi(i)}}(\vec{q}_i) \quad (1.3)$$

以及

$$\Psi_F(s_1, s_2, \cdots, s_n) [\vec{q}_1, \cdots, \vec{q}_n] = N' \sum_{\pi \in S_n} (-1)^\pi \bigotimes_{i=1}^n \psi_{s_{\pi(i)}}(\vec{q}_i) \quad (1.4)$$

其中 $(-1)^\pi$ 是置换 π 的符号， N 和 N' 是归一化常数，他们的值将在稍后确定。但是，显而易见的是现在的波函数的确是（反）对称的。他们的正交性可以验证，只需要注意到一次量子化的波函数具有这样的正交归一性：

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$