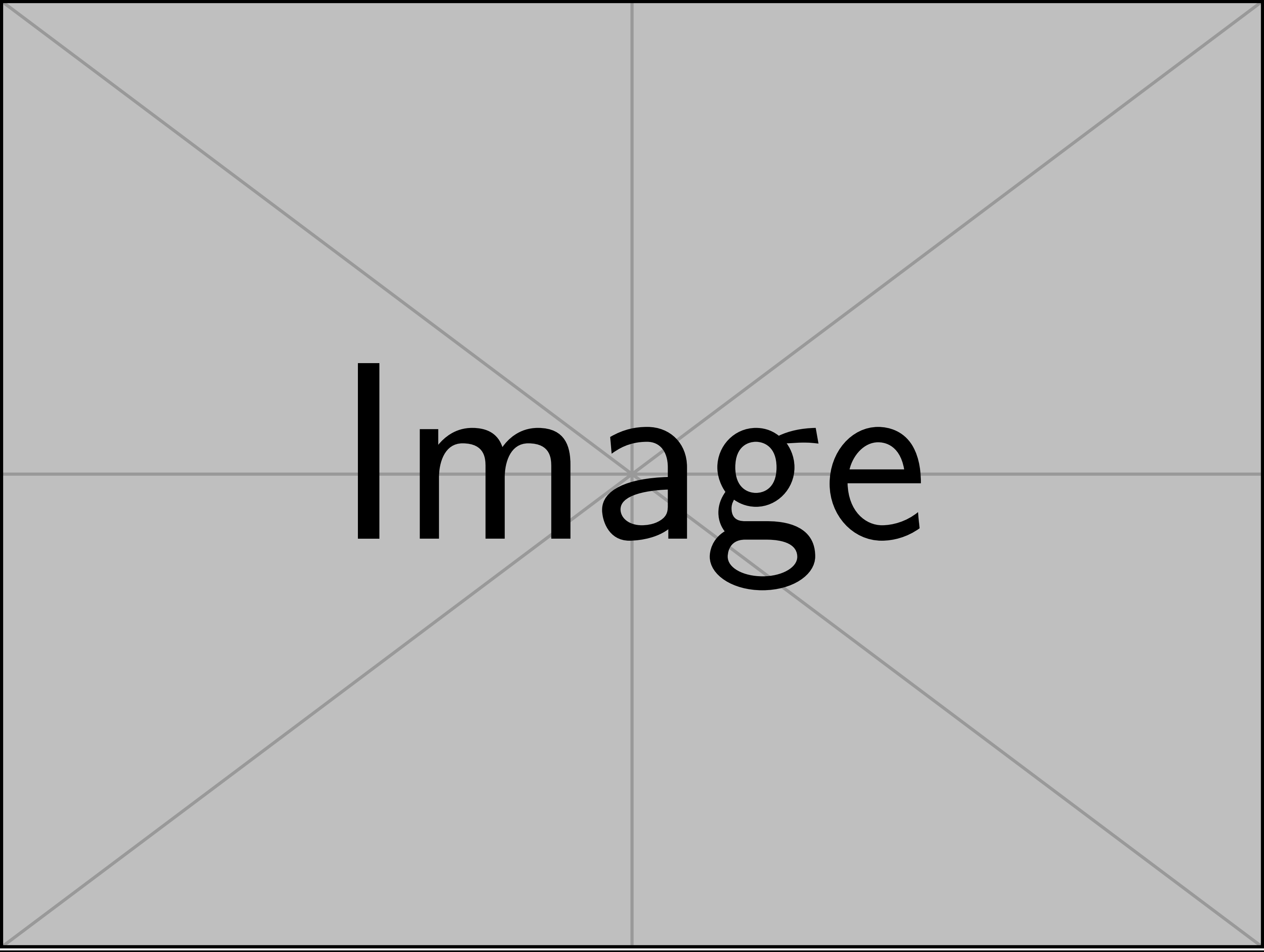

量子统计力学笔记

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

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。

1.1 量子多体问题的表述

一个量子多体问题本质上是一个 Schrodinger 方程的求解问题：

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

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

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

其次，粒子间的相互作用项形如：

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

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

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

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 $\{\hat{\vec{q}}_i\}$ 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 $\left(\hat{\vec{q}}_i,\hat{\vec{p}}_i\right) \leftrightarrow \left(\hat{\vec{q}}_j,\hat{\vec{p}}_j\right)$, 在坐标表象下成立

$$\Psi\left(\vec{q}_1,\cdots,\vec{q}_i,\cdots,\vec{q}_j,\cdots,\vec{q}_n\right) = e^{i\alpha}\Psi\left(\vec{q}_1,\cdots,\vec{q}_j,\cdots,\vec{q}_i,\cdots,\vec{q}_n\right).$$

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**。

我们希望写出一个便捷的 Hamilton 量与波函数的表示形式，尤其是计及粒子的全同性，为方便量子统计的计算。

1.2 多粒子波函数和 Fock 空间

我们只考虑一个粒子的情形，这时 Hamilton 量是：

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

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。