六、系统的粒子数分布的经典描述和量子描述

（量子系统和经典系统粒子数分布的描述）

系统的粒子数分布 和 微观状态 是二个不同的概念

粒子数分布：

- “速度的分布”
- “速率的分布”
- “动量的分布”
- “动量大小的分布”
- “能量的分布”

粒子数目按“量子态”的分布，

则为系统的“微观状态”。

雨课堂 Rain Classroom

粒子数按能量分布的量子描述

（量子系统粒子数分布的描述）

设：由全同粒子组成的量子系统，

其粒子数 N，能量 E，体积 V，

则粒子数分布的量子描述为：

能　级　$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_l, \cdots$

简并度　$\omega_1, \omega_2, \cdots, \omega_l, \cdots$

粒子数　$a_1, a_2, \cdots, a_l, \cdots$

序列 $\{a_l\}$ 就是粒子数按能量的“量子分布”

自然有： $\sum_l a_l = N \quad \sum_l a_l \varepsilon_l = E$ (约束条件)

$$\omega_{Total} = \sum_l \omega_l$$ 系统中粒子的总量子态数

给定总粒子数 N 后，有无数组 $\{a_l\}$ 的解！！

统计物理的根本任务，

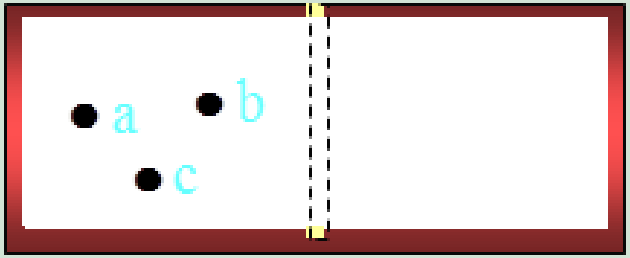
就是求出使微观状态数最大的分布 $\{a_l\}_{max}$(变分法)，

即：最大微观状态数对应的一组特殊的 $\{a_l\}$ 解，

此解即“最概然分布”，也即各种具体分布。

➢ 气体分子位置的分布规律

3个分子的分配方式



左半边	*abc*	*ab*	*bc*	*ac*	*a*	*b*	*c*	0
右半边	0	*c*	*a*	*b*	*bc*	*ac*	*ab*	*abc*

(微观态数2^3， 宏观态数4， 每一种微观态概率(1/2^3))

微观态：在微观上能够加以区别的每一种分配方式

宏观态：宏观上能够加以区分的每一种分布方式

对于孤立系统，各个微观态出现的概率是相同的

4个分子时的分配方式

左半边	*abcd*	*abc*	*bcd*	*cda*	*dab*	*ab*	*bc*	*cd*
右半边	0	*d*	*a*	*b*	*c*	*cd*	*ad*	*ab*
	da	*ac*	*bd*	*a*	*b*	*c*	*d*	0
	bc	*db*	*ac*	*bcd*	*cda*	*dab*	*abc*	*abcd*

(微观态数2^4,宏观态数5,每一种微观态概率($1/2^4$))

可以推知有N个分子时,分子的总微观态数2^N，总宏观态数$(N+1)$,每一种微观态概率$1/2^N$.

20个分子的位置分布

宏观状态		一种宏观状态对应的微观状态数Ω
左20	右0	1
左18	右2	190
左15	右5	15504
左11	右9	167960
左10	右10	184756
左9	右11	167960
左5	右15	15504
左2	右18	190
左0	右20	1

包含**微观状态数最多**的宏观状态是出现的**概率最大的状态**

分布： 以 $\{a_l\}$ 符号表示数列，以 a_1，$a_2,\cdots$，$a_l,\cdots$ 确定能级上的粒子数。

微观状态： 是粒子的运动状态。

分布只确定了每一个能级上有几个粒子

微观状态要求确定每一个量子态上的粒子数

Bolzmann系统：确定各能级 ε_l 上是哪 a_l 个粒子以及这 a_l 个粒子占据 ω_l 个量子态的方式

Bose(Fermi)系统：确定 a_l 个粒子占据 ω_l 个量子态的方式

一个分布 $\Longleftrightarrow$ 多个微观状态

排列(排队)与组合，
系统的微观状态数的一个简单计算

1、 排列(排队)

从 n 个不同的粒子中，取出 m 个，进行排列(排队)，

(或：用 n 个不同的粒子，填充 m 个格子，一个格子只能有一粒子)，

其中 $n \geq m$，

其排法(填法)共有：

$$P_n^m = n\times(n-1)\times(n-2)\times\ldots\ldots\times(n-m+1)$$

$$= \frac{n!}{(n-m)!}$$

对 n 个不同的粒子，进行全员排列(排队)，

(或：用 n 个不同的粒子，填充 n 个格子，一个格子只能有一个粒子

其排法(填法)共有：

$$n! = P_n^n = n\times(n-1)\times(n-2)\times\ldots\ldots\times 1$$

2、 组合

从 n 个不同的粒子中，取出 m 个，组成一组，

其中 $n \geq m$，

其组合法(组成法)共有： $C_n^m = \dfrac{P_n^m}{m!}$

1、玻耳兹曼量子统计的微观状态数

所讨论的系统：“半经典半量子系统”

即：粒子物理量的取值是“量子化的”，全同粒子是“可分辩的”， 一个量子态上的粒子数目不受限制

a. 粒子可区分　　　　粒子可以编号。

b. 每量子态的粒子数不限。

当各能级上的粒子数一定时，即粒子数按能量的分布给定时，

玻耳兹曼量子统计的微观状态数为：

$$\Omega_{M.B}=\frac{N!}{\prod_l a_l!}\prod_l \omega_l^{a_l}$$

2、玻耳兹曼量子分布

（玻耳兹曼量子统计中粒子数按能量的最概然分布）

所讨论的系统：“半经典半量子系统”

[数学准备]

由斯特林公式可得：当 $m \gg 1$ 时，

$$\ln m! \approx \int_1^m \ln x dx = m(\ln m - 1)$$

如果序列 $\{a_l\}_{max}$ 使系统的微观状态数取“极大值”，

那么，序列 $\{a_l\}_{max}$ 就是该系统的“最概然分布”。

最概然分布 $\{a_l\}_{max}$ 的求解：

由： $$\Omega = \frac{N!}{\prod_l a_l!}\prod_l \omega_l^{a_l}$$

以及： $N >> 1$， $a_l >> 1$，

得到：

$$\ln m! \approx \int_1^m \ln x dx = m(\ln m - 1)$$

$$\begin{aligned}\ln\Omega &= \ln N! - \sum_l \ln a_l! + \sum_l a_l \ln\omega_l \\ &= N(\ln N - 1) - \sum_l a_l(\ln a_l - 1) + \sum_l a_l \ln\omega_l \\ &= N\ln N - \sum_l a_l \ln a_l + \sum_l a_l \ln\omega_l\end{aligned}$$

雨课堂 Rain Classroom

使 $\ln\Omega$ 为极大值的分布 $\{a_l\}$，

必使 $\delta\ln\Omega=0$,

变分 $$\delta \ln \Omega = -\sum_l \ln\left(\frac{a_l}{\omega_l}\right)\delta a_l = 0$$

由约束条件： $$\sum_l a_l = N \qquad \sum_l a_l\varepsilon_l = E$$

得变分条件： $$\delta N = \sum_l \delta a_l = 0$$

$$\delta E = \sum_l \varepsilon_l \delta a_l = 0$$

由拉格朗日乘子法，得：

$$\delta \ln \Omega - \alpha \delta N - \beta \delta E$$

$$= -\sum_l \left(\ln \frac{a_l}{\omega_l} + \alpha + \beta \varepsilon_l \right) \delta a_l$$

$$= 0$$

其中 α 、 β 为不定因子，须由具体条件求出！！

$$\ln \frac{a_l}{\omega_l} + \alpha + \beta \varepsilon_l = 0$$

解得： $\boxed{a_l = \omega_l e^{-\alpha - \beta \varepsilon_l}}$

——— 麦克斯韦–玻耳兹曼分布

（玻耳兹曼量子分布）

即 α、β 满足以下关系：

$$N = \sum_l \omega_l e^{-\alpha-\beta\varepsilon_l}$$

$$= e^{-\alpha} \sum_l \omega_l e^{-\beta\omega_l}$$

$$E = \sum_l \varepsilon_l \omega_l e^{-\alpha-\beta\varepsilon_l}$$

$$= e^{-\alpha} \sum_l \varepsilon_l \omega_l e^{-\beta\omega_l}$$

3、玻耳兹曼经典分布

（玻耳兹曼经典统计中粒子数按能量的最概然分布）

将玻耳兹曼量子分布推广到经典系统情况，有：

$$a_l = \boxed{\frac{\Delta\omega_l}{h_0^r}} e^{-\alpha-\beta\varepsilon_l}$$

——— 麦克斯韦-玻耳兹曼分布

（玻耳兹曼经典分布）

七、玻色统计和费米统计

(玻色系统和费米系统的微观状态数
和粒子数按能量的最概然分布的计算)

1、 玻色系统的微观状态数

粒子不可分辩，一个量子态上的粒子数目不受限制

$$\Omega_{B.E}=\prod_l \frac{(\omega_l+a_l-1)!}{a_l!(\omega_l-1)!}$$

$$\ln\Omega_{B.E}=\sum_l\left[(\omega_l+a_l)\ln(\omega_l+a_l)-a_l\ln a_l-\omega_l\ln\omega_l\right]$$

2、 费米系统的微观状态数

粒子不可分辨，一个量子态上只能有一个费米子

$$\Omega_{F.D}=\prod_l \frac{\omega_l!}{a_l(\omega_l-a_l)!}$$

$$\ln\Omega_{F.D}=\sum_l\left[\omega_l\ln\omega_l-a_l\ln a_l-(\omega_l-a_l)\ln(\omega_l-a_l)\right]$$

3、 玻色分布和费米分布

(玻色系统和费米系统**粒子数按能量的最概然分布**)

由变分： $\delta \ln \Omega = 0$

及变分条件： $\delta N = \sum_l \delta a_l = 0$

$$\delta E = \sum_l \varepsilon_l \delta a_l = 0$$

得： $$\boxed{a_l = \frac{\omega_l}{e^{\alpha + \beta \varepsilon_l} \pm 1}}$$

其中，“+”为费米分布，“−”为玻色分布

雨课堂 Rain Classroom

三种统计的关系，经典极限条件（非简并性条件），

量子系统中的“非简并系统”

1、三个量子微观状态数的关系

当： $\frac{a_l}{\omega_l} \ll 1$ 时

即：“一个能级上的粒子数

远远小于该能级的简并度（数）

（量子态数）时”

称“经典极限条（非简并性条件）”

此时有：

$$\Omega_{B.E.}=\prod_l \frac{(\omega_l+a_l-1)!}{a!(\omega_l-1)!}$$

$$=\prod_l \frac{(\omega_l+a_l-1)(\omega_l+a_l-2)\cdots\omega_l}{a!}$$

$$\approx\prod_l \frac{\omega_l^{a_l}}{a!}=\frac{\Omega_{M.B.}}{N!}$$

$$\Omega_{F.D.}=\prod_l \frac{\omega_l!}{a!(\omega_l-a_l)!}$$

$$=\prod_l \frac{\omega_l(\omega_l-1)\cdots(\omega_l-a_l+1)}{a!}$$

$$\approx\prod_l \frac{\omega_l^{a_l}}{a!}=\frac{\Omega_{M.B.}}{N!}$$

雨课堂 Rain Classroom

在玻色和费米系统中，a_l 个粒子占据能级 ε_l 上的 ω_l 个量子态时本来是存在关联的，但在满足经典极限条件的情形下，由于每个量子态上的粒子数远小于1，粒子间的关联可以忽略。

这时有：
$$\Omega_{\mathrm{B.E.}} \approx \Omega_{\mathrm{F.D.}} \approx \frac{\Omega_{\mathrm{M.B.}}}{N!}$$

全同性的影响只表现在因子 $1/N!$ 上。

2、三个量子分布的关系

三个分布及其关系式可统一的写为：

$$a_l = \frac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l}+b} \qquad N=\sum_l \frac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l}+b} \qquad E=\sum_l \frac{\varepsilon_l\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l}+b}$$

其中，$b=+1$(玻色分布)，0(玻耳兹曼分布)，-1(费米分布)

由于 $e^{\beta\varepsilon_l}=e^{\frac{\varepsilon_l}{kT}}>0$ 总是成立，

所以，当 $e^{\alpha}>>1$(经典极限条件)时，

上面三式分母中的“b”可以略去，

即：玻色分布、费米分布就过渡到“玻耳兹曼分布”

3、量子系统中的“非简并系统”

总结上述情况，

满足非简并性条件(经典极限条件) $\frac{a_l}{\omega_l} << 1$

$e^{\alpha} >> 1$的系统，为“非简并系统”。

非简并性系统的微观状态数为：$\Omega_{M.B}/N!$

其粒子数按能量的最概然分布为玻耳兹曼量子分布。

量子系统中的“定域系统”

某些粒子，比如晶体中的原子或离子，

不停地在其平衡位置附近做微小振动，

那么，可通过这些粒子的位置，对它们加以分辩。

上述粒子称“定域粒子”，

由定域粒子组成的系统，称“定域系统”。

这样，这些原本不可分辩的量子粒子，可作为“可分辩粒子”处理：

可（近似）用玻耳兹曼量子统计进行描述：

该系统的微观状态数为 $\Omega_{M.B}$，

其粒子数按能量的最概然分布为玻耳兹曼量子分布。

本课程对“一个系统”、“一种统计”的讨论中，

着重关注：（1）物理量取值是否连续；

（2）粒子是否可分辩；

（3）一个量子态上的粒子数是否受限制。