

第一章 基本原理与概念

1. 系统的微观状态及其描述

微观状态的经典描写：如果子系有 r 个自由度,其微观状态需用 $2r$ 个变量来描写, 即 r 个广义坐标 q_1, q_2, \dots, q_r 和相应的 r 个广义动量 p_1, p_2, \dots, p_r . 子系的能量表达式一般为坐标和动量的函数:

$$\varepsilon = \varepsilon(q_1, \dots, q_r; p_1, \dots, p_r)$$

微观态的量子描写：对于现阶段的学习 来说，知道下面两点就够了。

(1)微观状态是一些量子态，可以用一个或一组量子数标志，相应的微观力学量(如能量、动量等)的取值是不连续的，或者说是

(2) 全同粒子系统·全同性原理

统计物理学研究的系统是由大量的微观粒子所组成的，而微观粒子可以分为两类：

1.全同粒子

指粒子的内禀性质（如质量、电荷、自旋等）完全相同。全同粒子组成的多粒子系统遵循全同性原理，即交换任意两个全同粒子不产生新的量子态。全同粒子是经典力学中所没有的，因为在经典力学中，粒子的轨迹是确定的，即使内禀性质相同，也可以通过粒子轨迹对粒子加以区分。

全同粒子又根据粒子自旋分为两类：费米子和玻色子：

1.费米子：自旋为 \hbar 的半奇整数倍，波函数是反对称的。费米子遵从泡利不相容原理，即不允许有两个全同的费米子处于同一个单粒子量子态。玻色子组成的子系遵从Bose-Einstein 分布。

2.玻色子：自旋为 \hbar 的整数倍，波函数是对称的，玻色子不遵从泡利不相容原理。费米子组成的子系遵从Fermi-Dirac 分布。

2.非全同粒子

指粒子可分辨。非全同粒子构成定域子系，定域子系遵从Boltzmann分布。

2. 宏观=Avg(微观)

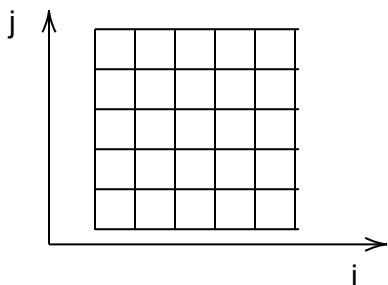
3. 等几率原理

等几率原理是平衡态统计理论的基本假设。等几率假设意味在一定条件下，各个可能出现的微观状态出现的几率都一样。直到目前为止，等几率原理仍然是一条基本假设，是平衡态统计物理学唯一的基本假设。不过，我们无需怀疑它的正确性，因为一百多年来，基于等几率原理所建立的平衡态统计理论及其一切推论，经受了实验的检验，证明了它的正确性。

4. 经典连续体系的相空间

从配分函数说开去： $Z = \sum_r e^{-\beta E_r}$. 我们知道配分函数实际上是遍历所有微观状态求和，那么如何离散化微观状态就成了一个关键问题。相空间则是我们用于标定微观状态的地方。此外，对于连续模型，如何离散化也是我们要考虑的问题。

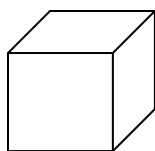
EXAMPLE.1 二维伊辛模型



微观状态 $\{S_{ij}\}$:
$$\begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & \dots & S_{1L} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & \dots & S_{2L} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & \dots & S_{3L} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ S_{L1} & S_{L2} & S_{L3} & \dots & S_{LL} \end{bmatrix}$$
 ,其中 $[1, L] \ni i, j$, $S_{ij} = \pm 1$, 微观状态数:

$\# = 2^{L^2}$ (共有 L^2 个 sites, 每个 site 有两种可能), 能量: $H = \sum_{ij} -J(S_{ij}S_{i+1j} + S_{ij}S_{j+1})$, 配分函数为 $z = \sum_{\{S_{ij}\}} e^{\beta \sum_{ij} J(S_{ij}S_{i+1j} + S_{ij}S_{j+1})}$. 对于 2D Ising Model, 可以数值求解, 也可以求 Onsager 严格解。

EXAMPLE.2 平面波量子模型



单粒子波函数: $\psi(\vec{x}) \sim e^{i \frac{2n_x \pi x}{L_x}} e^{i \frac{2n_y \pi y}{L_y}} e^{i \frac{2n_z \pi z}{L_z}}$, $n_x n_y n_z$ 标定了一个能级:

$$\epsilon_{n_x n_y n_z} = \frac{2\hbar^2 \pi^2}{m} \left[\left(\frac{n_x}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{n_y}{L_y} \right)^2 + \left(\frac{n_z}{L_z} \right)^2 \right]$$

令 $m_{n_x n_y n_z}$ 为能级的占据数, 则一个微观状态可由所有能级的占据数组成的数组 $\{m_{n_x n_y n_z}\}$ 表示, 由此可以表出配分函数:

$$Z = \sum_r e^{-\beta E_r} = \sum_{\{m_{n_x n_y n_z}\}} e^{-\beta \sum_{n_x n_y n_z} (m_{n_x n_y n_z} \epsilon_{n_x n_y n_z})} \quad (1)$$

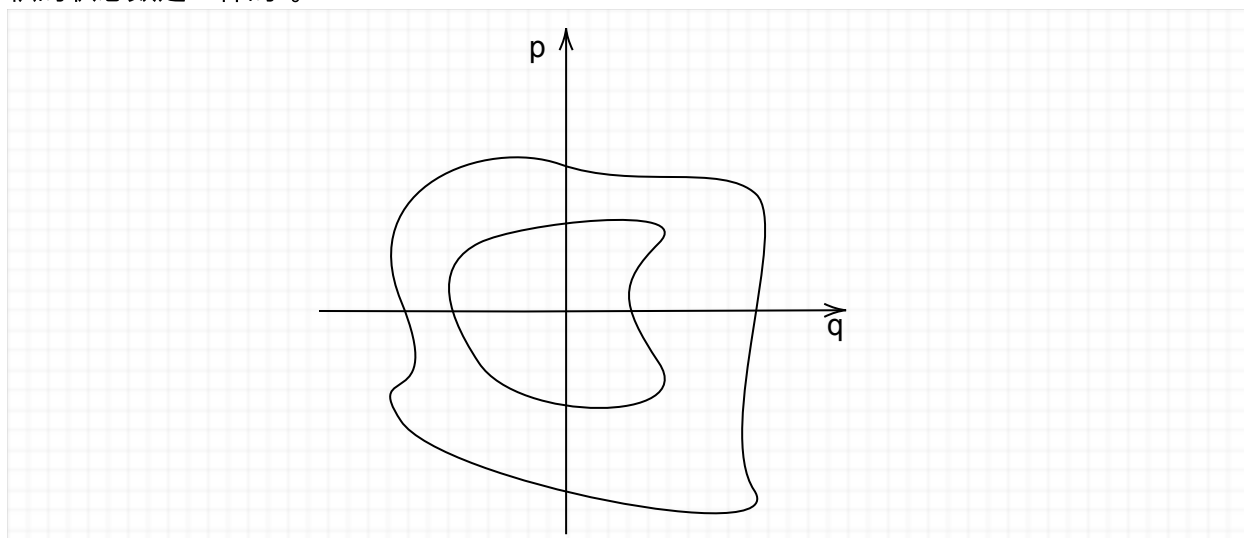
EXAMPLE.3 经典连续体系

前面两个例子中微观状态都是天然离散的, 然而在经典连续体系中, 若想遍历所有微观状态求和, 必须对体系进行离散化。那么如何离散化? 答案是 somerfeld 量子化:

$$\oint p_i dq_i = n_i h \quad (2)$$

其中 $(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \dots, \vec{q}_N; \vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N)$, 简记为 (q_i, p_i) , $i \in [1, 3N]$. 直观含义是相空间中单位面

积的状态数是一样的¹。



$$\Sigma_r \longrightarrow \frac{1}{h^{3N}} \int d^3\vec{q}_1 \cdots d^3\vec{q}_N d^3\vec{p}_1 \cdots d^3\vec{p}_N$$

¹ 这里 (q_i, p_i) 是正则坐标，在正则变换下积分测度不变。