第六章 近独立粒子的最概然分布

※概述

【任务】：从微观角度研究热运动的规律，研究与热现象运动有关的物性及宏观系统的演化。该任务与热力学的任务相同。

【方法】： 两者有差异：

热力学：是热运动的宏观理论，通过对热现象的观测、试验和分析，人们总结出热现象的基本规律（热力学第 I-III 定律）

统计物理：是热运动的微观理论。它从宏观物质系统是由大量微观粒子所构成的这一事实出发，认为物质的宏观性质是：大量微观粒子性质的集体表现。即：

1）宏观物质系统　大量微观粒子组成
2）物质的宏观性质大量微观粒子性质的集体表现
3）宏观物理量　微观物理量的统计平均值。
4）统计物理深入到热运动的本质。
   把三个热力学相互独立的定律归结于一个基本的统计原理。
   阐明三个定律的统计意义。
   解释涨落现象。
5）局限性：使用的物质微观模型所作的往往是简化模型；所得到的结果是近似的。

【本章内容】：

1）粒子运动状态的两种描述；
2）系统微观运动状态的描述
3）三种分布及关系（玻尔兹曼、玻色分布、费米分布）

§6.1 粒子运动状态的经典描述

1、粒子的运动状态

粒　　子：组成宏观物质系统的基本单元。
如:气体的分子、金属离子、电子、辐射场中的光子等。

运动状态：力学运动状态。

经典描述：若粒子遵从经典力学的运动规律，对粒子运动状态的描述称为～。

量子描述：若粒子遵从量子力学的运动规律，则对粒子运动状态的描述称为～。

注：　从原则上讲，微观粒子是遵从量子力学运动规律的，不过经典理论在一定极限条件下，仍然具有意义。

2、经典描述

某粒子，自由度＝r

任一时刻的力学运动状态可以由粒子的广义坐标、广义动量来描述，即：

广义坐标： $q_1, q_2, \cdots, q_r$　　　(r个)

广义动量： $p_1, p_2, \cdots, p_r$　　　(r个)

粒子能量：$\varepsilon=\varepsilon(q_1, q_2,\cdots, q_r; p_1, p_2,\cdots, p_r)$

若有外场， ε 还要包含外场对能量的贡献影响。

引入一个 μ 空间：共有 2r 个变量为直角坐标，构成一个 2r 维 μ 空间—空间。

粒子在某一时刻的力学运动状态可用 μ 空间中的某一点来描述——粒子运动状态的代表点。粒子的运动状态随时间改变时，代表点相应的点在 μ 空间中移动，描画出一条轨道。

3、实例分析

（一） 自由粒子

1）自由粒子： 不受外力作用而作自由运动的粒子。

如： 无外场时 $\left\{\begin{matrix}\text{理想气体分子}\\ \text{金属自由电子}\end{matrix}\right\rangle \Rightarrow$ 自由粒子

2）三维空间中的情形

自由度： $f=3$

坐标： x, y, z

动量： $p_x = m\dot{x},\quad p_y = m\dot{y},\quad p_z = m\dot{z}$

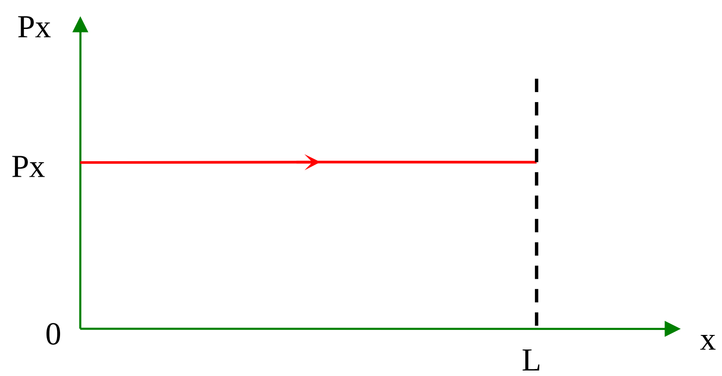
能量：（仅动能） $\varepsilon = \dfrac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$

3）一维自由粒子

参量： $m,\quad x,\quad p_x = mx$

空间：二维的 μ 空间

图示：



(二) 线性谐振子

1、线性谐振子的定义

质量为 m 的粒子在弹性力 F=-Ax 作用下，在原点附近做简谐振动，称为~。

振动的圆频率：$\omega=\sqrt{A/m}$

$$\begin{pmatrix}\because F=-Ax=m\ddot{x}\Rightarrow\ddot{x}=-\dfrac{A}{m}x=-\omega x\\ \ddot{x}+\omega^2x=0\end{pmatrix}$$

例如：一定条件下，可视为谐振动：

$$\begin{cases}\text{分子内原子的振动}\\ \text{晶体中原子、离子在其平衡位置附近振动。}\end{cases}$$

2、自由度为 1 的一维线性谐振子

位置：x

动量：$p=m\dot{x}$

能量：$\varepsilon=T+V=\dfrac{p^2}{2m}+\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2$

以 x 和 p 为直角坐标，可构成二维的 μ 空间，振动在任一时刻的运动状态由 μ 空间中的一点来表示。

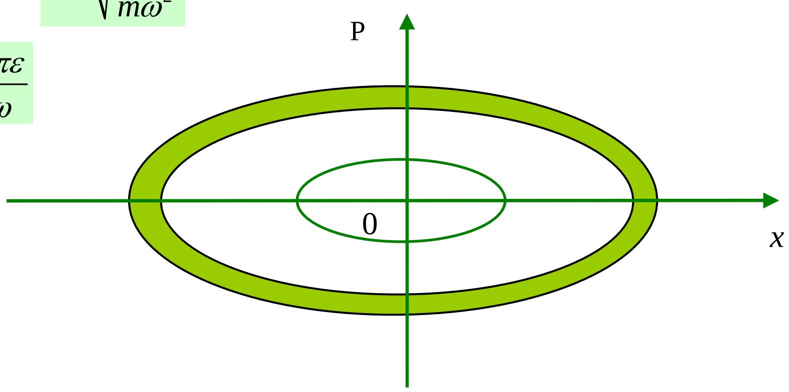
椭圆标准式：$\varepsilon=\dfrac{p^2}{2m}+\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2$

$$\frac{p^2}{2m\varepsilon}+\frac{x^2}{\dfrac{2\varepsilon}{m\omega^2}}=1$$

半轴：$a=\sqrt{2m\varepsilon}$，$b=\sqrt{\dfrac{2\varepsilon}{m\omega^2}}$

椭圆的面积：$s=\pi ab=\dfrac{2\pi\varepsilon}{\omega}$

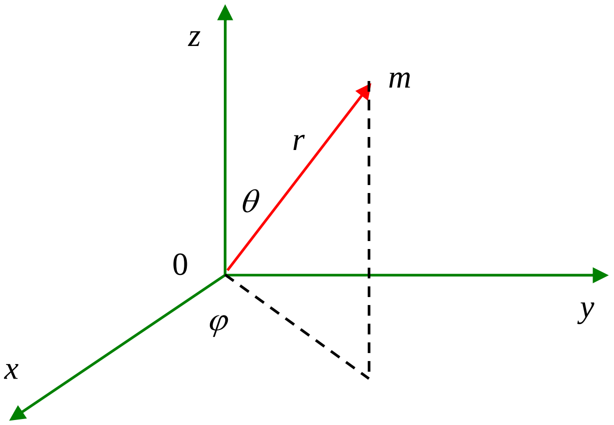
相图：



（三）转子

1、转子：质量的质点 A 被一定长度的轻杆系于原点 O 时所作的运动。

2、三维坐标



Rt 坐标中：

坐标：x，y，z

动能：$\varepsilon=\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)$

在球坐标（r，θ，φ）中

坐标：$\begin{array}{l} x=r\sin\theta\cos\varphi \\ y=r\sin\theta\sin\varphi \\ z=r\cos\theta \end{array}$

动能：$\varepsilon=\frac{1}{2}m(\dot{r}^2+r^2\dot{\theta}^2+r^2\sin^2\theta\dot{\varphi}^2)$

∵ 杆子长度一定，即质点到原点距离一定。

∴ $\dot{r}=0$

∴ $\varepsilon=\frac{1}{2}m(r^2\dot{\theta}^2+r^2\sin^2\theta\dot{\varphi}^2)$

引入与θ,φ共轭的动量：

$p_\theta=mr^2\dot{\theta}$， $p_\varphi=mr^2\sin^2\varphi\dot{\varphi}$

则： $\varepsilon=\frac{1}{2I}(p_\theta^2+\frac{1}{\sin^2\theta}p_\varphi^2)$ 其中：$I=mr^2$

（质点对原点 O 的转动惯量）

注意：

$$\begin{cases} 1)\ \ \theta\in[0,\pi],\varphi\in[0,2\pi],p_\theta,p_\varphi\text{取任意值，质点自由度2，}\mu\text{空间中是四维的；} \\ 2)\ \ \text{二体问题可约化为单体问题，用约化质量：}\mu=\frac{m_1\bullet m_2}{m_1+m_2} \end{cases}$$

例如：双原子分子视为绕质心转动的转子。

3、二维平面内的转子

固定$\theta=\frac{\pi}{2}$， $p_\theta=0$，则转化为二维平面内的转子。

$$\begin{aligned}\varepsilon&=\frac{1}{2}m(\dot{r}^2+r^2\dot{\theta}^2+r^2\sin^2\theta\dot{\varphi}^2)\\&=\frac{1}{2}mr^2\sin^2\theta\dot{\varphi}^2=\frac{1}{2I}mr^2mr^2\sin^2\theta\dot{\varphi}^2\\&=\frac{1}{2I}(mr^2\dot{\varphi})^2=\frac{(\mathrm{r}\bullet\mathrm{p})^2}{2\mathrm{I}}\end{aligned}$$

其中是转子的总角动量，在无外力作用时，守恒。

§6.2 粒子运动状态的量子描述

1、微观粒子的波-粒二象性

微观粒子： 光子、电子、质子、中子、原子、分子等；

波粒二象性：$\begin{cases}1) \text{ 客观存在的单个实体；} \\ 2) \text{ 适当条件下显示干涉、衍射等波动现象}\end{cases}$

2、德布罗意假设

粒子性： 能量 ε 动量 P

波动性： 圆频率 ω 波矢 k

关系式：$\begin{cases}\varepsilon = \hbar\omega \\ \vec{p} = \hbar\vec{k}\end{cases}$ （$h\nu = \frac{h\nu 2\pi}{2\pi} = \frac{h}{2\pi}\omega = \hbar\omega$）；

普适常量：$\begin{cases}h = 6.626\times10^{-34}\, J\bullet s \\ \hbar = 1.055\times10^{-34}\, J\bullet s\end{cases}$ 普朗克常量

量纲为：$[t][E] = [l][p] = [\text{角动量}]$

$J\cdot s = F\cdot l\cdot s = l\cdot F\cdot s = \text{长度}\cdot\text{动量} = r\times p = \text{角动量}M$

3、测不准关系（不确定关系）

微观粒子不可同时具有精确德动量和坐标。

$$\Delta q\cdot\Delta p \approx h$$

即：$\begin{cases}\Delta q \to 0, \text{ 则}\Delta p \to \infty \\ \Delta p \to 0, \text{ 则}\Delta q \to \infty\end{cases}$

说明微观粒子的运动不是轨道运动。

注意：量子态：在量子力学中，微观粒子的运动状态称为量子态。

表征： 量子态由一组量子数表征

粒子自由度：量子数的数目等于粒子的自由度数。

4、实例说明

（一）自旋

粒子： 电荷 $-e$； 质量为 m

自旋角动量量子数为 $\frac{1}{2}$（有内禀角动量——自旋，或内禀磁矩）

自旋磁矩： μ

自旋角动量：S

关系：$\frac{\mu}{S} = -\frac{e}{m}$

外场： 方向 Z; 磁感应强度 β

自旋角动量 S 在外场方向的投影：$S_z = \pm\frac{\hbar}{2}$

自旋磁矩在外场方向的投影： $\mu_z = \mp\frac{e\hbar}{2m}$

粒子在外磁场中的势能： $-\mu\beta = \pm\frac{e\hbar}{2m}\beta$

自旋角动量的投影分量： $S_z = m_s\hbar = \pm\frac{1}{2}\hbar \Longrightarrow$

描述粒子自旋状态的量子数 m_s： $\pm\frac{1}{2}$ (分立值)

（二）线性谐振子

圆频率： ω

能量： $\varepsilon_n = \hbar\omega(\text{n}+\frac{1}{2})$ （n=0, 1, 2,⋯）

量子数： n ———表征线性谐振子运动状态和能量的量子数。

能级： 分立的能量称为能级。线性谐振子的能级是等间隔的。能级差为，其大小取决于圆频率 ω

（三）转子

能量： $\eta = \frac{M^2}{2I}$

M^2 取值：$\begin{cases} \text{经典理论中--可取任何正值；} \\ \text{量子理论中--只能取分立值。} \end{cases}$

$M^2 = l(l+1)\hbar^2$, $l = 0,1,2,\cdots$

对于给定的 l，角动量在某一 Z 轴上的投影 M_z 只能取分立值：

$M_z = m\hbar$, $m = -l, -l+1, \cdots, l-1, l$ $(2l+1\text{个})$

注：

量子力学中自由度为 2 的转子的运动状态，由两个量子数 l，m 表征。

空间量子化： 量子理论中，m 只能取分立值，运动平面在空间的取向是量子化的。

故：转子能量是量子化的。

$\varepsilon_l = \frac{l(1+1)\hbar^2}{2\text{I}}$, $l = 0,1,2,\cdots$； $m = -l, -l+1, \cdots, l-1, l$ $(2l+1\text{个})$

注：

1）转子运动状态由两个量子数 l，m 表征。转子的能量只由量子数 l 描述。

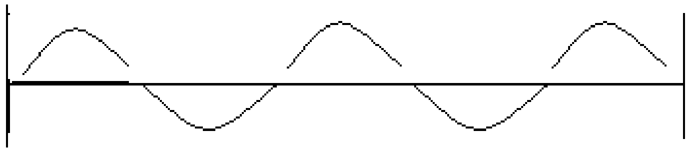
2）简并度

能量为的量子态有 $2l+1$ 个，则能级是简并的，简并度为：$2l+1$

即一个能级的量子态数称为该能级的简并度。
非简并： 若某一能级只有一个量子态，该能级称为非简并的。
例如： 一维线性振子的能级是非简并的。

（四）自由粒子

1、一维自由粒子



周期性边界条件粒子可能的运动状态，其德氏波长 λ 的整数倍等于容器德长度 L，即：

$$L = |n_x| \bullet \lambda, \quad |n_x| = 0,1,2,\cdots$$

波矢大小 k_x 与波长的关系：考虑两个传播方向，则有波矢可能值为：

$$k_x = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{L} n_x, \quad n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

粒子动量可能值为：

$$P_x = \frac{2\pi\hbar}{L} n_x \qquad n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots,$$ （利用德氏关系）

（注： n_x 就是表征一维自由粒子的运动状态的量子数。

粒子的能量可能值为：

$$\varepsilon_{n_x} = \frac{p_x^2}{2m} = \frac{2\pi^2\hbar^2}{m} \frac{n_x^2}{L^2}, \qquad n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

（能量值也取决于量子数 n_x， 量子数为 1， n_x ）

※ 一维自由粒子的量子数 1，-------------n_x

2、三维自由粒子

设粒子处于边长为 L 立方体容器内，粒子三个动量分量

$$\begin{cases} p_x = \dfrac{2\pi\hbar}{L} n_x, & n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \\ p_y = \dfrac{2\pi\hbar}{L} n_y, & n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \\ p_z = \dfrac{2\pi\hbar}{L} n_z, & n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \end{cases}$$

n_x，n_y，n_z 为三维自由粒子运动状态的量子数为 3， n_x，n_y，n_z

能量可能值为：

$$\varepsilon=\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)=\frac{2\pi^2\hbar^2}{m}\frac{n_x^2+n_y^2+n_z^2}{L}$$

三维自由粒子的量子数为 3： n_x，n_y，n_z 简并度为 6

见例题 P224

注意：

1）粒子局限在微观大小的空间内运动时，能量和动量值是分立值；

2）粒子的运动状态由三个量子数表征 n_x，n_y，n_z；

$$\left.\begin{cases}\text{能级值取决于的}\,n_x^2+n_y^2+n_z^2\ \text{数值}\\ \text{而量子态不止一个}\end{cases}\right\rangle\text{能级是简并的，量子数为3个，简并度为6}$$

3）在宏观大小的容器空间内运动，动量和能量是准连续的。

在体积 V=L³ 内，动量在：$\begin{cases}dp_x\sim & p_x-p_x+dp_x\\ dp_y\sim & p_y-p_y+dp_y\\ dp_z\sim & p_z-p_z+dp_z\end{cases}$ 内

自由粒子的量子态数为：

$$\begin{cases}dn_x=\dfrac{L}{2\pi\hbar}dp_x\\ dn_y=\dfrac{L}{2\pi\hbar}dp_y\\ dn_z=\dfrac{L}{2\pi\hbar}dp_z\end{cases}\Longrightarrow \begin{aligned}dn_xdn_ydn_z&=\left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3dp_xdp_ydp_z\\&=\left(\frac{L}{h}\right)^2dp_xdp_ydp_z\end{aligned}$$

3、粒子运动状态的描述

1） 一维粒子 用坐标 q 和动量 p 来描述粒子的阿运动状态，一个状态对应 μ 空间的一个体积———一个相格。

对于 $f=1$， μ 空间是由$\left.\begin{cases}\text{一个坐标r}\\ \text{一个动量p}\end{cases}\right\rangle$描述的二维空间。

相格大小 $\Delta q\Delta p\sim h$ （一维）

2）r 维自由粒子

推广到自由度为 r 的情形：

$$\left.\begin{aligned}&\text{坐标r个}:\Delta q_1,\Delta q_2,\cdots,\Delta q_r\\&\text{动量r个}:\ \Delta p_1,\Delta p_2,\cdots,\Delta p_r\\&\text{利用}:\qquad \Delta q_i\bullet\Delta p_i\approx h\end{aligned}\right\}\Longrightarrow$$

$2r$ 维 μ 空间中，粒子一个状态所对应的相格大小为：

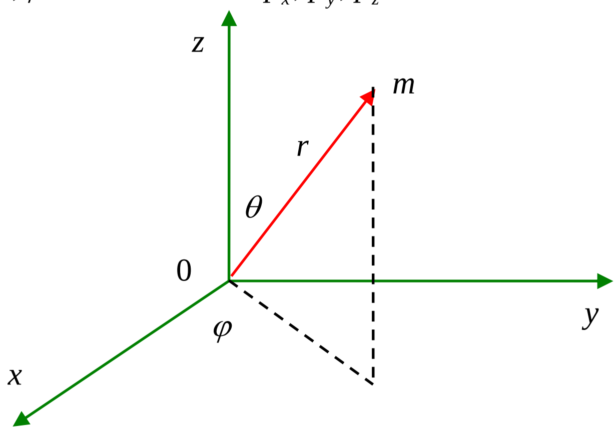
$$\Delta q_1 \cdot \Delta q_2 \cdots\cdots \Delta q_r \cdot \Delta p_1 \cdot \Delta p_2 \cdots\cdot \Delta p_r \approx h^r$$

故，自由粒子的量子态数为：（三维自由）

$$\frac{V}{h^3} dp_x dp_y dp_z$$

上述表达式的意义是：将 μ 空间的体积 $Vdp_x dp_y dp_z$ 除以相格大小 h^3，而得到的三维自由粒子在内的量子数。

4、粒子动量（用动量空间的球坐标 p,θ,φ 来描写） 代替 p_x, p_y, p_z



$$p_x = p\sin\theta\cos\varphi$$
$$p_y = p\sin\theta\sin\varphi$$
$$p_z = p\cos\theta$$

动量空间的体积元为：

$$dV = p^2 \sin\theta dp d\theta d\varphi$$

故在体积 V 内，动量大小在：

$$p \sim p + dp$$

动量方向在：$\theta \sim \theta + d\theta, \varphi \sim \varphi + d\varphi$ 范围内，自由粒子可能的状态数为：

$$\frac{Vp^2 \sin\theta d\theta d\varphi dp}{h^3} \qquad \begin{cases} \theta \in [0, \pi] \\ \varphi \in [0, 2\pi] \end{cases}$$

对方位角积分有：$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta = 4\pi$

得到在体积 V 内动量在 $p \sim p + dp$ 中，方向任意的范围内的粒子可能状态数为：

$$\frac{4\pi V}{h^3} p^2 dp$$

据公式：$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$ 由上公式求得：

在体积 V 内，在能量范围 $\varepsilon \sim \varepsilon + d\varepsilon$ 内的自由粒子可能状态数为：

$\because \quad p = \sqrt{2m\varepsilon}$ ，

$$d = \frac{2p}{2m}dp = \frac{p}{m}dp = \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{m}dp$$
$$dp = m(2m\varepsilon)^{-\frac{1}{2}}d\varepsilon$$

$$\therefore \quad \frac{4\pi V}{h^3}\times 2m\varepsilon \bullet m \bullet (2m\varepsilon)^{-\frac{1}{2}}d\varepsilon = \frac{2\pi V}{h^3}(2m)^{\frac{3}{2}}\varepsilon^{\frac{1}{2}}d\varepsilon = D(\varepsilon)d\varepsilon$$

其中：$D(\varepsilon)=\frac{2\pi V}{h^3}(2m)^{\frac{3}{2}}\varepsilon^{\frac{1}{2}}$ 表示单位能级间隔内的可能状态数，称为态密度。

4、由自旋的粒子状态

考虑自旋的贡献，粒子的自旋量子数为$\frac{1}{2}$，自旋角动量在动量方向的投影为$\pm\frac{\hbar}{2}$两个值。故上面求得结果均应乘上因子 2。

【思考题】:

一、填空题：

1、统计物理学从宏观物质系统是由________________组成这一事实出发,认为物质的宏观特性是________________________的集体表现,宏观物理量是相应__________________的统计平均值。

（参考答案：大量微观粒子。大量微观粒子行为， 微观物理量）

2、热力学是物质运动的__________理论，统计物理学是物质热运动的________理论。

3、在量子力学中微观粒子的运动状态称为__________________________。

4、在光子、^{4}He 核、电子、中子等粒子中，属于玻色子有____________________；而属于费米子________________________________。

5、下列各量中，如：热量、熵、内能、焓、温度、体积、摩尔热容量、压强、自由能、质量。属于广延量的是：__________________________________；属于强度量的是：____________-__________________________________

二、选择题

1、热力学研究的对象是（　　）

A、大量微观粒子组成的宏观系统　B、大量微观粒子组成的微观系统

C、仅适合于理想气体　　D、仅适合于均匀物质系统

（参考答案：A）

2、系统的宏观特性是大量微观粒子行为的集体表现，这是（　）的观点。

A、热力学 B、统计物理 C、量子理论 D、热力学与统计物理

（参考答案：B）

3、关于热力学和统计物理的任务与研究方法的描述，正确的有（ ）

A. 任务和方法都相同 B.任务和方法都不相同

C. 任务相同而方法不相同 D.方法相同而任务不相同

（参考答案：C）

3、等概率原理是下列哪些理论的基础（ ）

A. 仅仅是最概然分布理论 B. 仅仅是系综理论

C. 最概然分布理论和系综理论 D. 准热力学理论

简答题：

1、什么是微观粒子的全同性原理？

2、简述等概率原理

3、统计物理基本假设

§6.3 系统微观运动状态的描述

★ 简介

回顾：前两节已经分别介绍了粒子运动状态的经典、量子描述；

内容：本节将进一步讨论如何描述系统的微观运动状态（也有两种方法）：

方法：经典描述和量子描述。

对象： 全同粒子、近独立粒子组成的系统（引入简化模型）

1、全同粒子与近独立粒子

1) 全同粒子（系统）：

由具有完全相同的属性的同类粒子组成的系统。（相同的质量、电荷。自旋等）

例如：$\begin{cases} 4He\text{原子组成的氦气；} \\ \text{自由电子组成的自由电子气。} \end{cases}$

2) 近独立粒子（系统）

粒子之间相互作用很弱，相互作用的能量远小于单个粒子的平均能量，由这样的同类粒子组成的系统。

整个系统的能量：

注意：

① 公式中只是第个粒子的坐标、动量及外场参量的函数，与其它粒子的坐标和动量无关。

② 理想气体——近独立粒子组成的系统，理想气体除了相互碰撞的瞬间外，可以认为没有相互作用。

2、系统微观运动状态的经典描述

$$\begin{cases} a\text{、可分辨粒子（可跟踪的经典轨道运动）} \\ b\text{、描述方式：相空间中}N\text{个点。} \end{cases}$$

1）粒子自由度 r

第 i 个粒子的力学运动状态：

$$\begin{cases}\text{广义坐标：} q_{i1}, q_{i2}, \cdots, q_{ir} \\ \text{广义动量：} p_{i1}, p_{i2}, \cdots, p_{ir}\end{cases} \quad (i = 1,2,\cdots,N)$$

N 个粒子 组成的系统中的变量数目：$N \bullet 2r$ 个，每一个粒子的运动状态确定了，则总个系统在该时刻的运动状态也就确定了。

2）经典全同粒子的可分辨性

运动可分辨 $\Longleftarrow$ 粒子轨道运动可以被跟踪 $\Longleftarrow$ 轨道运动

两个粒子 i，j 的运动状态加以变换：

交换前 $\Rightarrow$ 交换后

$$\begin{cases} i\ (q_1', \cdots, q_r'; p_1', \cdots, p_r') \\ j\ (q_1'', \cdots, q_r''; p_1'', \cdots, p_r'') \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} i\ (q_1'', \cdots, q_r''; p_1'', \cdots, p_r'') \\ j\ (q_1', \cdots, q_r'; p_1', \cdots, p_r') \end{cases}$$

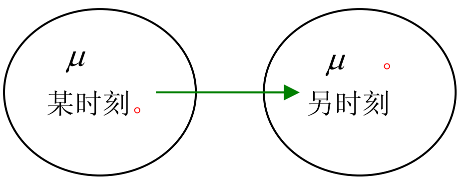
3）描述方式：

μ 空间（相空间）中，运动状态的描述：

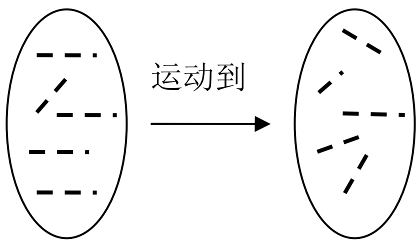
单个粒子 $\xrightarrow{\text{推广到}}$ N 个粒子系统

某时刻的运动状态用μ空间中 $2r$个变量对应的一个点来表示：

$$\begin{cases} 2r\text{个位置坐标} \\ 2r\text{个动量坐标} \end{cases}$$



每一个粒子在空间中对应于一个点，共有N个点表示整个系统在该时刻的一个运动状态。



某时刻　　另一时刻

3、系统微观运动状态的量子描述

$$\begin{cases} a\text{、可分辨粒子（物质波的非轨道几率运动）} \\ b\text{、描述方式:}\begin{cases}\Delta\text{对于某一个粒子的各个量子态} \\ \Delta\text{对应于每一个量子态的粒子数。}\end{cases} \end{cases}$$

1）微粒的全同性原理：（量子物理的一个基本原理）

全同粒子是不可分辨的，在含有多个全同粒子的系统中，将任何两个全同的粒子加以对换，不改变整个系统的微观运动状态。

注意：

① 经典物理中，全同粒子可分辨。

② 原因：

$$\begin{cases}\text{经典粒子运动是轨道运动，可跟踪而辨认}\\ \text{量子粒子运动是具有波粒二象性的非轨道几率运动，不可跟踪的，}\\ \text{而不可分辨，见图例说明（图6.5）}\end{cases}$$

2）描述方法：

$$\left.\begin{array}{l}\text{若全同粒子可分辨}\rightarrow\text{确定每一个粒子的个体量子态}\\ \text{若全同粒子可分辨}\rightarrow\text{确定每一个个体量子态上的粒子数}\end{array}\right\}\Rightarrow\begin{cases}\text{确定系统的}\\ \text{微观运动状态}\end{cases}$$

由于描述结果与构成系统的粒子性质有关，因此，我们先介绍粒子及相应系统的特点。

即确定系统由多少个量子态组成，而粒子分布在各个量子态的方式也有多种可能，每一次分布对应于系统的一种可能的微观状态，因此，即归结为寻找 n 个粒子分布在各个量子态上的方式总共有多少种可能———即系统就有多少种可能的微观状态。

例题：He 气体的微观状态 ← 状态确定由每一组量子数所表征的个体量子态上有多少个 He 原子

$$\text{系统微观状态数}\Leftarrow\text{量子态数}\Leftarrow\begin{cases}\text{每个量子态上分}\\ \text{布有多少个粒子}\end{cases}\Leftarrow\text{有多少种分布方式}$$

3) 微观粒子及其系统的分类

A、粒子分类———据微观粒子的自旋角动量量子数的特性来区分：

费米子：自旋量子为半整数的基本粒子及复合粒子（即$\dfrac{1}{2}$）

$$\text{例如:}\begin{cases}\text{基本粒子}--\text{电子、质子、中子}\\ \text{复合粒子}--{}^{2}H\text{原子、}{}^{3}H\text{核}\quad(\text{奇数个费米子组成的})\end{cases}$$

玻色子：自旋量子数为整数的基本粒子或复合粒子

$$\text{例如:}\begin{cases}\text{基本粒子}--\text{光子}=1\text{、}\pi\text{介子}=0\\ \text{复合粒子}--{}^{1}H\text{原子、}{}^{4}H\text{原子、}{}^{2}H\text{核、}{}^{4}H\text{核}\quad(\text{偶数个费米子组成的})\end{cases}$$

B、系统分类———三种类型的系统

玻尔兹曼系统：由可分辨的全同粒子组成，且处在一个个体量子态上容纳的粒子数不受限制的系统。（两个特点：可分辨、不受限制）；

玻色系统：粒子不可分辨，每一个个体量子态上所容纳的粒子数不受限制。

费米系统：粒子不可分辨，每一个个体量子态上最多可容纳一个粒子。

C、泡利不相容原理

在含有多个全同近独立的费米子的系统中，一个个体量子态上最多可以容纳一个费米子。

4) 例题分析

三种系统中，粒子占据的量子态的情况各不相同，相应的量子态数目也不同，下面举例说明。

设 A，B 表示可分辨的两个粒子，个体量子态有 3 个，占据三个量子态的方式有如下：

系统	特征	量子态 1	量子态 2	量子态 3	微观状态数
玻尔兹曼系统	1、可分辨 2、不受限制	AB			9 种
			AB		
				AB	
		A	B		
		B	A		
			A	B	
			B	A	
		A		B	
		B		A	
玻色系统	1、不可分辨 2、不受限制	AA			6 种
			AA		
				AA	
		A	A		
			A	A	
		A		A	
费米系统	1、不可分辨 2、受限制 只 1 个	A	A		3 种
			A	A	
		A		A	

4、本节小节

1） 本节介绍了描述全同粒子、近独立（组成的）多粒子系统的微观运动状态，为后面讨论近独立粒子的统计分布作准备。

2）两种统计物理学

由此而衍生出两种：

经典统计物理：在经典力学的基础上建立起来的；
量子统计物理：在量子力学的基础上建立起来的。

3）联系与区别

相同点： 在统计原理上相同；
区别 ： 对于微观运动状态的描述不同。

4）两种统计方法：

量子统计 $\xrightarrow{\text{极限条件}}$ 经典统计

§6.4 等概率原理

一、简介

§6.3 节讲述了描述全同近独立粒子组成的多粒子系统的微观状态的两种方法：

$$\left.\begin{cases}\text{经典描述}\\ \text{量子描述}\end{cases}\right\rangle \Rightarrow \text{有两个原理}\begin{cases}\text{全同性原理}\\ \text{泡利不相容原理}\end{cases}$$

§6.6 节将要讲述平衡态下，近独立粒子的最概然分布；
§6.4 节将讲述等概率原理————平衡态统计理论的基本假设。

二、对比宏观状态与微观状态

热力学　　　　　　统计物理

|————⇓—————|

宏观物质系统的特性

↓————————————↓

讨论系统的宏观性质（对应于一个状态） $\xleftarrow{\text{集体表现}}$ 系统的微观状态（大量的复杂状态）

⇑　　　　　　⇑

宏观参量表征 $\xleftarrow{\text{统计平均}}$ 微观物理量

⇑

例如：孤立系统平衡态某一（N, V, E）状态

⇑

描述手段及规律

[实验定律 / 宏观理论]

⇑

描述手段及规律

经典描述　量子描述

[μ空间中 N个点对应一个状态]　[量子态 粒子数 分布]

要解决的首要问题

⇓

统计物理的根本问题：确定各微观状态出现的概率

⇓

等概率原理

三、等概率原理

1、提出：19 世纪 70 年代由玻尔兹曼提出的描述，某个孤立系统平衡状态时，

该系统各个可能的微观状态出现的概率特征的。

2、内容：对于处在平衡状态的孤立系统，其各个可能的微观状态出现的概率是相等。

3、备注：统计物理中的一个基本假设，是平衡态统计物理的基础，第九章进一步讨论。

§6.5 分布和微观状态

一、分布

1）某系统确定的宏观平衡状态下，具有的宏观状态参量为：

$$\begin{cases}\text{粒子数}N\\ \text{能量}E\\ \text{体积}V\end{cases}$$

2）分布（微观角度）

$$\text{粒子的能级}\begin{cases}\text{粒子的能级：} & \varepsilon_1,\ \varepsilon_2,\cdots,\ \varepsilon_l,\cdots\\ \text{简并度：} & \omega_1,\omega_2,\cdots,\ \omega_l,\cdots\\ \text{粒子数：} & a_1,\ a_2,\cdots,\ a_l,\cdots\end{cases}$$

以符号 $\{a_l\}$ 表示数列：a_1，$a_2,\cdots$，$a_l,\cdots$，称为一个分布。对于确定具有 N,E,V 的系统。分布 $\{a_l\}$ 必须满足的条件：

$$\begin{cases}\sum_l a_l = N\\ \sum_l a_l\varepsilon_l = E\end{cases}$$

★注意：

① 分布只确定了每一个能级 ε_l 上的粒子数；

② 还必须确定系统的微观状态 $\Leftarrow$ 确定每一个个体量子态上的粒子数。

二、微观状态 Ω

对于给定的某一个宏观状态（N, E, V）

$\Downarrow$

对应于一个分布 $\{a_l\}$

$\Downarrow$

系统在该分布下的微观状态是大量的

$\Downarrow$

微观状态数目 Ω

$\Downarrow$

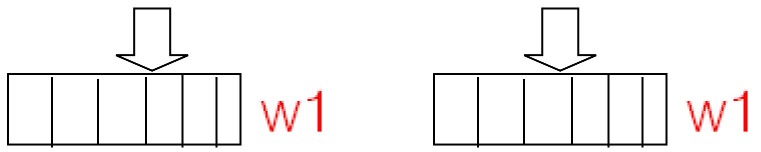
$\overbrace{\text{玻耳兹曼系统 \quad 玻色系统 \quad 费米系统 \quad 经典系统}}$

1、 玻尔兹曼系统

粒子特征：$\begin{cases} a）\text{可分辨} \\ b）\text{各个量子态上容纳的粒子数不受限制} \end{cases}$

ε_1 ……………… ε_1

$[a_1个]$ $[a_l个]$



$$\underbrace{a_1 \uparrow \quad \underbrace{\omega_1 \cdots \omega_1}_{\uparrow a_1个} = \omega_1^{a_1} \qquad\qquad a_l \uparrow \quad \underbrace{\omega_1 \cdots \omega_1}_{\uparrow a_l个} = \omega_1^{a_l}}$$

a_1，$a_2,\cdots$，$a_l,\cdots$个编了号的粒子分别占据能级ε_1，$\varepsilon_2,\cdots$，$\varepsilon_l,\cdots$上各个量子态

共：$\prod_l \omega_l^{a_l}$，交换 N 个粒子，得到交换数为 N!，除掉重复的部分：$\dfrac{N!}{\prod_l a_l!}$

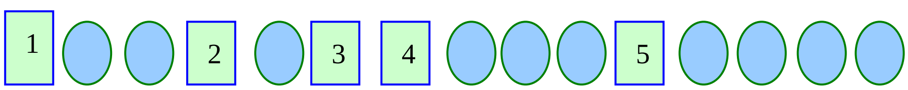
故得到与分布$\{a_l\}$相应的系统的微观状态数为：

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

2、 玻色系统

粒子特征：$\begin{cases} a）\text{不可分辨} \\ b）\text{各个量子态上容纳的粒子数不受限制} \end{cases}$

计算a_l个粒子占据能级ε_l上的ω_l个量子态有多少种可能的方式：



↑

固定

固定 1，剩下量子态＋粒子数总和：$(\omega_l + a_l - 1)$个

排列方式有：$(\omega_l + a_l - 1)!$个 （粒子不可分辨）

除去$\begin{cases}\text{粒子间的相互交换数：} a_l! \\ \text{量子态之间相互交换数：} \omega_l! \end{cases}$

得到该能级ε_l中a_l个粒子占据ω_l个量子态的可能方式：

$$\frac{(\omega_l + a_l - 1)!}{a_l!(\omega_l - 1)!}$$

玻色系统与分布相应的微观状态数为：

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

3、 费米系统

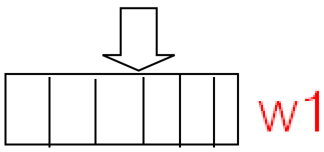
粒子特征：$\begin{cases} a\text{）不可分辨} \\ b\text{）各个量子态上容纳的粒子数不受限制} \end{cases}$

注意：粒子数$a_l \le$量子态ω_l （$\omega_l \ge a_l$）

a_l个粒子占据ε_l能级上ω_l个量子态：

ε_1

$[a_l$个粒子$]$



相当于从ω_l量子态中挑出a_l个来为粒子所占据，共有占据方式为：

$$C_{\omega_l}^{a_l} = \frac{\omega_l!}{a_l!\,(\omega_l - a_l)!}$$

故得到费米系统与分布相应的微观状态数为：

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

4、经典极限条件（非简并性条件）

条件：若任一能级ε_l上的粒子数a_l均远小于该能级的量子态数ω_l，即：

$$\frac{a_l}{\omega_l} \ll 1 \qquad (\text{对所有的}l)$$

则：玻色系统：

$$\Omega_{B,E}=\prod_l \frac{(\omega_l+a_l-1)!}{a_l!(\omega_l-1)!}=\prod_l \frac{(\omega_l+a_l-1)(\omega_l+a_l-2)\cdots\omega_l}{a_l!}$$

$$=\prod_l \frac{\omega_l^{a_l}}{a_l!}\quad=\frac{1}{N!}\Omega_{M,B}$$

而：费米系统：

$$\Omega_{F,D}=\prod_l \frac{\omega_l!}{a_l!(\omega_l-a_l)!}=\prod_l \frac{\omega_l(\omega_l-1)\cdots(\omega_l-a_l+1)}{a_l!}$$

$$=\prod_l \frac{\omega_l^{a_l}}{a_l!}\quad=\frac{1}{N!}\Omega_{M,B}$$

注意：经典极限条件表示，平均而言处在每一个量子态上粒子数均远小于 1。

5、经典系统（思考题）

讨论经典统计中的分布和微观状态数。

单个粒子某时刻的运动状态	N个粒子某时刻的运动状态
⇓	⇓
$\begin{cases} r\text{个广义坐标}（q_1,\cdots q_r） \\ r\text{个广义动量}（p_1,\cdots p_r）\end{cases}$	第i个粒子$\begin{cases} r\text{个广义坐标}（q_1,\cdots q_r） \\ r\text{个广义动量}（p_1,\cdots p_r）\end{cases}$
⇓	⇓
$2r$维μ空间中一个点表示一个状态	$2r$维μ空间中N个代表点表示该时刻的一个状态。

∵ q, p 连续变化，粒子和系统的微观运动状态数都是不可数的。

⇓

分 q, p 为小间隔

⇓

$\delta q_i\cdot\delta p_i=h_0$ （μ空间中一个相格大小)

⇓

划分 μ 空间为许多体积元 $\Delta\omega_l$

∴

体积元： $\Delta\omega_1$， $\Delta\omega_2,\cdots$， $\Delta\omega_l,\cdots$

简并度： $\dfrac{\Delta\omega_1}{h_0^r},\dfrac{\Delta\omega_2}{h_0^r},\cdots,\dfrac{\Delta\omega_l}{h_0^r},\cdots$

能级： ε_1， ε_2， $\cdots$， ε_l， $\cdots$

粒子数： a_1， a_2， $\cdots$， a_l

与分布$\{a_l\}$对应的微观状态数Ω_{cl}有：

$$\Omega_{cl}=\frac{N!}{\prod_l a_l!}\prod_l\left(\frac{\Delta\omega_l}{h_0^r}\right)^{a_l}$$

§6.6 玻尔兹曼分布

［ 本节内容 ］

※ 了解最概然分布的概念；

※ 推导波尔兹曼系统的粒子的最概然分布公式。

一、最概然分布（最可几分布）

据等概率原理，对于处在平衡态的孤立系统，每一个可能的微观状态出现的概率是相等的，因此微观状态数目最多的分布，出现的概率最大，称为~。

平衡态的孤立系统-----一个宏观状态（可用 N，E，V 描述）

$\Downarrow$

对应一个分布

$\Downarrow$

系统存在大量的微观状态数

$\Downarrow$

每种可能状态出现的几率是相等的

$\Downarrow$

微观状态数最多的分布，出现的概率最大

$\Downarrow$

此种分布为最概然分布

二、玻耳兹曼分布（麦-玻分布）

1、近似公式

$$\ln m!=m(\ln m-1)\qquad (m>>1)\qquad (6.6.1)$$

利用斯特令公式：

$$m!=m^m e^{-m}\sqrt{2\pi m}$$

$$\ln m! = m(\ln m - 1) + \frac{1}{2}\ln(2\pi m)$$

（足够大时，上公式第二项与第一项相比可以忽略，过渡到第一式情形）

2、 推导过程

（∵ 最概然分布是使为极大值的分布，而又∵ $\ln\Omega$ 随 Ω 的变化是单调的，∴ 可以等价讨论使 $\ln\Omega$ 的极大的分布来代替 Ω 的极大分布。）

玻耳兹曼系统的微观状态数 Ω 是：

$$\Omega = \frac{N!}{\prod_l a_l!}\prod_l \omega_l^{a_l} \qquad (6.6.2)$$

两边取对数有：

$$\ln\Omega = \ln N! - \sum_l \ln a_l! + \sum_l a_l \ln\omega_l \qquad (6.6.3)$$

假设所有的都很大，则有：

$$\ln\Omega = N(\ln N - 1) - \sum_l a_l(\ln a_l - 1) + \sum_l a_l \ln\omega_l$$

$$= N\ln N - \sum_l a_l \ln a_l + \sum_l a_l \ln\omega_l \qquad (6.6.4)$$

若令各个 a_l 有 δa_l 的变化，$\ln\Omega$ 将因而有 $\delta\ln\Omega$ 的变化，使 $\ln\Omega$ 为极大的分布 $\{a_l\}$ 必使 $\delta\ln\Omega$ =0：

$$\delta\ln\Omega = -\sum_l \ln\left(\frac{a_l}{\omega_l}\right)\delta a_l = 0 \qquad (6.6.5)$$

但是这些 δa_l 不完全是独立的，它们必须满足条件：

$$\begin{cases} \delta N = \sum_l \delta a_l = 0 \\ \delta E = \sum_l \varepsilon_l \delta a_l = 0 \end{cases} \quad \text{（孤立系统）}$$

引入拉格朗日未定乘子 α 和 β 乘这两个式子，并从减去得：

$$\delta\ln\Omega - \alpha\delta N - \beta\delta E = -\sum_l (\ln\frac{a_l}{\omega_l} + \alpha + \beta\varepsilon_l)\delta a_l = 0 \qquad (6.6.6)$$

利用拉格朗日原理，每个 δa_l 的系数都等于零，所以有：

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

此式玻耳兹曼系统的粒子的最概然分布公式：（称为麦克斯韦-玻耳兹曼分布）

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

其中拉氏乘子α和β由下公式确定：

$$\begin{cases} N = \sum_l \omega_l e^{-a_l-\beta\varepsilon_l} \\ E = \sum_l \varepsilon_l \omega_l e^{-a_l-\beta\varepsilon_l} \end{cases}$$

3、上式另一种表述：

∵ 假设能级 ε_l 有 ω_l 个量子态，处在其中任何一个量子态的平均粒子数应是相同的，故处在能级 ε_l 的量子态 S 上的平均粒子数为： $f_s = e^{-\alpha-\beta\varepsilon_s}$

$$\Rightarrow \begin{cases} N = \sum_s e^{-\alpha-\beta\varepsilon_s} \\ E = \sum_s \varepsilon_s e^{-\alpha-\beta\varepsilon_s} \end{cases}$$ （对所有量子态求和）

---

§6.7 玻色分布和费米分布

1、玻色系统的最概然分布：

$$\Omega_{B,E} = \prod_l \frac{(\omega_l + a_l - 1)!}{a_l!(\omega_l - 1)!} \Rightarrow a_l = \frac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l} - 1}$$

其中 α，β 满足条件：

$$\begin{cases} \sum_l \frac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l} - 1} = N \\ \sum_l \varepsilon_s \frac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l} - 1} = E \end{cases}$$

2、费米系统的最概然分布：

$$\Omega_{F,D} = \prod_l \frac{\omega_l!}{a_l!(\omega_l - a_l)!} \Rightarrow a_l = \frac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l} + 1}$$

其中 α，β 满足条件：

$$\begin{cases} \sum_l \frac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l} + 1} = N \\ \sum_l \varepsilon_s \frac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l} + 1} = E \end{cases}$$

注意：上面公式推导过程有缺陷，因为近似条件实际上并不满足，故在第九章中，讲述另外一种推导。

3、经典统计中玻耳兹曼分布 a_s

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

其中α，β 满足条件：
$$\begin{cases}\sum_l a_l = \sum_l e^{-\alpha-\beta\varepsilon_l}\dfrac{\Delta\omega_l}{h_0^r} = N \\ \sum_l a_l\varepsilon_s = \sum_l e^{-\alpha-\beta\varepsilon_l}\dfrac{\Delta\omega_l}{h_0^r}\varepsilon_s = E\end{cases}$$

§6.8 三种分布的关系

一、三种分布

玻耳兹曼分布：$a_l = \omega_l e^{-\alpha-\beta\varepsilon_l}$

玻 色 分 布 ：$a_l = \dfrac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l}-1}$

费 米 分 布 ：$a_l = \dfrac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l}+1}$

其中参数有下述条件确定：其中α，β满足条件：

$$\begin{cases}\sum_l a_l = N \\ \sum_l a_l\varepsilon_l = E\end{cases}$$ 对三种分布均可，即有：

$$
\begin{cases}
\text{麦-玻分布:}\begin{cases}\sum\limits_l \omega_l e^{-a_l-\beta\varepsilon_l}=N,\sum\limits_l \varepsilon_l\omega_l e^{-a_l-\beta\varepsilon_l}=E\end{cases}\\
\text{玻-爱分布:}\begin{cases}\sum\limits_l \dfrac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l}-1}=N,\sum\limits_l \varepsilon_s\dfrac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l}-1}=E\end{cases}\\
\text{费-狄分布:}\begin{cases}\sum\limits_l \dfrac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l}+1}=N,\sum\limits_l \varepsilon_s\dfrac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l}+1}=E\end{cases}\\
\text{经　典分布:}\begin{cases}\sum\limits_l a_l=\sum\limits_l e^{-\alpha-\beta\varepsilon_l}\dfrac{\Delta\omega_l}{h_0^r}=N\\ \sum\limits_l a_l\varepsilon_s=\sum\limits_l e^{-\alpha-\beta\varepsilon_l}\dfrac{\Delta\omega_l}{h_0^r}\varepsilon_s=E\end{cases}
\end{cases}
$$

二、经典极限条件（非简并性条件）

四种系统的微观状态数分别为：

$$
\begin{cases}
\text{麦-玻系统：}\ \Omega_{M.B.}=\dfrac{N!}{\prod\limits_l a_l!}\prod\limits_l \omega_l^{a_l}\\
\text{玻-爱系统：}\ \Omega_{B.E.}=\prod\limits_l \dfrac{(\omega_l+a_l-1)!}{a_l!(\omega_l-1)!}\\
\text{费-狄系统：}\ \Omega_{F.D.}=\prod\limits_l \dfrac{\omega_l!}{a_l!(\omega_l-a_l)!}\\
\text{经　典系统：}\ \Omega_{cl}=\dfrac{N!}{\prod\limits_l a_l!}\prod\limits_l \left(\dfrac{\Delta\omega_l}{\mathrm{h}_0^{\mathrm{r}}}\right)^{a_l}
\end{cases}
$$

对于玻色分布和费米分布的系统，若参数 α 满足条件：

$e^{\alpha}>>1$ 则玻色、费米分布均过度到玻耳兹曼分布：

$$
\text{即：}\left.\begin{cases}\text{玻色分布}:a_l=\dfrac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l}-1}\\ \text{费米分布}:a_l=\dfrac{\omega_l}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l}+1}\end{cases}\right\rangle\Rightarrow a_l=\omega_l e^{-\alpha-\beta\varepsilon_l}
$$

其中条件：$e^{\alpha}>>1 \xrightleftharpoons{\text{等价于}} \dfrac{a_l}{\omega^l}<<1$ （对所有 l ）

因此得到：$\Omega_{B.E.}\approx\dfrac{\Omega_{M.B.}}{N!}\approx\Omega_{F.D.}$

注意：

1）因为 N 是常数，满足极限条件时，玻色、费米系统中的近独立粒子在平衡态时，遵从玻耳兹曼分布，一般气体属于这种情形。

2）粒子可分辨性 $\Leftarrow$ 自然界有些系统，可视为定期系统：

$$\begin{cases}\text{晶体中的原子、离子；}\\ \text{在平衡位置做微小振荡}\end{cases}$$

3）
$$\left.\begin{cases}\text{定域系统}\\ \text{满足经典极限条件的}\begin{cases}\text{玻色}\\ \text{费米}\end{cases}\end{cases}\right\rangle \Rightarrow \begin{matrix}\text{遵从同样分布但}\\ \text{微观状态数不同}\end{matrix} \Rightarrow \begin{cases}\Omega_{M.B.}\\ \dfrac{\Omega_{M.B.}}{N!}\end{cases}$$

作业：