统计物理大意

By xudong

为啥要写这个？

因为下周要讲的文献涉及到很多统计物理中的知识，提前预热一下这方面的知识是有好处的，我们可以把更多的精力放在这篇文献真正有价值的部分，讨论能够进行的更深入。这篇短文的目的是让大家花费尽可能少的时间和精力了解统计物理是怎样工作的。

统计物理都研究什么？

想想一个气体系统涉及的宏观量，内能，熵，压强，温度，体积，热容等等，压强，温度，体积，热容是能够测量的物理量，内能和熵是不可测量的。这些宏观量不是互相独立的，而是互相关联的，我们希望知道的是这些宏观量之间具体的依赖关系，说的更具体一点，我们希望用最少的可测量来表示其他宏观量。比如说 T，V 为独立变量，我们希望得到

$$S = S(T, V)$$

$$E = E(T, V)$$

$$C_v = C_v(T, V) \quad \text{等容热容}$$

$$P = P(T, V) \quad \text{状态方程}$$

这些函数关系的具体表达形式。事实上这个目的和热力学的目的是相同的，只是统计物理和热力学实现这个共同目的的方式不同。

统计物理三步走——统计物理是如何工作的

统计物理包括上面三个步骤，下面逐步说明每一步的含义，最后举一个简单的例子来说明整个过程。

【分布】

状态 s 的能量为E_s，一个粒子处于状态 s 的概率正比于

$$P_s \propto e^{-\beta E_s}$$

这就是玻尔兹曼定理，其中$\beta = \frac{1}{kT}$。

这个定理如何得来，这里不做详细说明，感兴趣的的可以参看玻色分布，费米分布，半经典近似

【计算配分函数】

定义配分函数为

$$z=\sum_s e^{-\beta E_s}=\sum_i g_i e^{-\beta E_i}$$

其中g_i是能级E_i的简并度，也就是能级E_i上有g_i个可能的状态。

【计算宏观量】

下面我们给出如何通过配分函数求宏观量的计算公式。如果大家好奇这些公式怎么得来可以参看《统计物理学》by 王诚泰 P200-P202，推导过程都十分简单。

$$\beta=\frac{1}{kT}$$

$$E=-N\frac{\partial \mathrm{Log}[z]}{\partial \beta}$$ 计算内能

$$C_v=\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V$$ 计算等容比热

$$P=\frac{N}{\beta}\frac{\partial \mathrm{Log}[z]}{\partial V}$$ 通过这个公式可以得到状态方程$P=P(T,V)$

$$S=Nk\left(\mathrm{Log}[z]-\beta\frac{\partial \mathrm{Log}[z]}{\partial \beta}\right)+S_0$$ S_0为常数

【例子——单原子理想气体】

考虑体积为 V 的箱子中的理想气体。

首先第一步写出分布。

我们要完全描述箱子内一个原子的状态需要六个参数，分别是 xyz 三个坐标以及$p_x p_y p_z$三个动量。给定原子的状态后我们就能够计算原子的能量。能量包括两部分，一部分是原子平动的动能，另一部分和箱子体积关，当原子在箱子里面时这部分的能量为 0，由于箱子不能穿透箱子外面的能量为无穷大。用公式表达这两部分的能量为：

$$e=\frac{{p_x}^2+{p_y}^2+{p_z}^2}{2m}+U_{\text{箱子}}$$

$$U_{\text{箱子}}=\begin{cases}0 & \text{在箱子里面}\\ \infty & \text{在箱子外面}\end{cases}$$

所以单个原子的分布为如下形式：

$$\mathrm{Exp}\left[-\beta\left(\frac{{p_x}^2+{p_y}^2+{p_z}^2}{2m}+U_{\text{箱子}}\right)\right]$$

其次计算配分函数。

首先需要给出一个关系，单原子一个状态对应的相空间的体积为h^3，所以对于相体积$\mathrm{dxdydzdp}_x\mathrm{dp}_y\mathrm{dp}_z$包含的状态数为$\frac{\mathrm{dxdydzdp}_x\mathrm{dp}_y\mathrm{dp}_z}{h^3}$，所以配分函数可以写成：

$$z=\sum_s \mathrm{Exp}\left[-\beta\left(\frac{{p_x}^2+{p_y}^2+{p_z}^2}{2m}+U_{\text{箱子}}\right)\right]\frac{\mathrm{dxdydzdp}_x\mathrm{dp}_y\mathrm{dp}_z}{h^3}$$

由于是连续情形，我们将求和改成积分：

$$z=\int\ldots\int \mathrm{Exp}\left[-\beta\left(\frac{{p_x}^2+{p_y}^2+{p_z}^2}{2m}+U_{\text{箱子}}\right)\right]\frac{\mathrm{dxdydzdp}_x\mathrm{dp}_y\mathrm{dp}_z}{h^3}$$

积分得（积分过程省略，即使不会积分也没关系，数学计算不是关键）：

$$z=\frac{V}{h^3}(2\pi mkT)^{\frac{3}{2}}$$

这样我们就完成了第二步，计算配分函数。

最后计算宏观量。

求出配分函数这一步就十分简单，之需要套用前面列出的计算宏观量的公式就行了。

$$E=-N\frac{\partial \mathrm{Log}[z]}{\partial\beta}=\frac{3}{2}NkT$$

$$C_v=\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V=\frac{3}{2}Nk$$

$$P=\frac{N}{\beta}\frac{\partial \mathrm{Log}[z]}{\partial V}=\frac{NkT}{V}$$

如果想知道的更多

可以参看这两本书

《统计物理——伯克利物理教程第五卷》http://www.douban.com/subject/1863183/

这本书比简单，内容也较少只讲了统计的系综理论，不过作者的物理思维非常非常赞，不需要动笔计算，作者会带着你得到大多数统计物理的结果，这才像搞物理的。另外书中有很多图和 toy model，很形象很直观。

《统计物理学——by 王诚泰》http://www.douban.com/subject/1549593/?i=0

这本书内容丰富，讲解的也很清楚明白，习题有答案。如果想最快速的了解统计物理，推荐看第四章，第五章，第七章。后面的习题有很多也相当不错用来开阔视野，锻炼灵活应用统计物理中的概念和方法很有帮助。