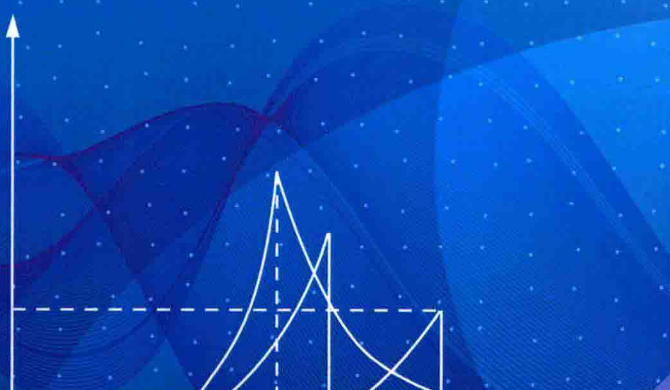
普通高等教育"十三五"规划教材

高等统计力学导论

(第二版)

梁希侠 编著



科学出版社

普通高等教育“十三五”规划教材

高等统计力学导论

（第二版）

梁希侠　编著

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书是作者积多年讲授物理专业硕士研究生学位课程“量子统计与多粒子理论”的教学经验编写而成的，分为“统计力学的基本理论”和“统计力学的量子场论方法”两编，包括经典统计系综理论、量子统计系综理论、理想量子气体、非理想气体、相变的平均场理论、相变的重整化群理论概要、量子场论预备知识、零温格林函数、重整化方法、有限温度下的格林函数、电子-声子系格林函数，共11章. 本书内容着重基本理论、基本方法和基本应用，体系完整、理论自恰、概念规范，是一本简明易读的教材和自学参考书.

本书可作为理工科相关专业研究生学位课程和本科高年级选修课程教材，也可供从事物理学和现代应用技术研究与开发者自学和实际工作参考.

图书在版编目（CIP）数据

高等统计力学导论 / 梁希侠编著. —2 版. —北京：科学出版社，2019.1
普通高等教育“十三五”规划教材
ISBN 978-7-03-058282-9

Ⅰ. ①高… Ⅱ. ①梁… Ⅲ. ①统计力学-高等学校-教材
Ⅳ. ①O414.2

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2018）第 159275 号

责任编辑：罗　吉　崔慧娴 / 责任校对：张凤琴
责任印制：吴兆东 / 封面设计：华路天然工作室

科学出版社出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com

北京建宏印刷有限公司 印刷
科学出版社发行　各地新华书店经销
*
2000年3月内蒙古大学出版社第一版　开本：720×1000　1/16
2019年1月第二版　印张：20
2019年1月第一次印刷　字数：403 000

定价：65.00元
（如有印装质量问题，我社负责调换）

第二版前言

本书编写宗旨是为物理专业硕士研究生学位课程“量子统计与多粒子理论”和物理专业本科相应选修课程提供一本简明的教材或教学参考书，也为自学者提供一本简明的读本. 全书内容着重基本理论、基本方法和基本应用，撰写把握基本、实用、简单原则，体系力求统一完整，文字尽量简明易读. 遵循上述原则，本次修订保持基本内容和深度不变，除全面修正和改进文字表述外，仅对章节略作调整，内容适当增删.

本书第一版分为“统计力学的基本理论”、“相变与重整化群理论”和“格林函数理论”三编. 考虑到连续相变理论亦属统计力学内容，且本书仅作简介，不必单独成编，本次修订将其并入第一编. 第二版由“统计力学的基本理论”和“统计力学的量子场论方法”两编构成.

为使学习者更集中精力理解统计力学最基本的理论和方法，本次修订删去关于达尔文-否勒法(原2.7节)和杨-李理论(原5.5节)的介绍，增加关于磁捕获稀薄气体玻色-爱因斯坦凝聚的讨论(新增3.7节). 为使读者更好地理解格林函数的基本理论，掌握其基本方法，相应内容略有增加. 例如，将“高密度电子气”适当增补内容后单列一节(9.5节)，介绍了“等离体子”及相关集体激发的概念；补充了电子-声子相互作用之描述和应用实例的内容：第7章单列“电子-声子相互作用”一节(7.3节)；新增第11章“电子-声子系格林函数”. 其他具体增补、修改在此不再赘列.

作为“导论”，本书旨在引导读者入门，未触及更多研究专题. 书中给出的实例，只为验证理论、诠释概念、演示方法，希望通过剖析实例达到深入理解概念，初步掌握方法的目的. 如欲了解学科动向和前沿进展，尚须进一步阅读有关专著和综述文献. 本书只望为之提供必要的知识基础. 修订中，笔者力求精炼文字、控制篇幅，保持轻量级读本的特点. 尽管如此，本版厚度还是较前有所增加.

自本书发行以来，一些学校和教师将其作为研究生、本科生教材或教学参考书，并提出十分宝贵的意见和建议，特此致谢！本版修订得到教育部“热物理系列课程”国家级教学团队、内蒙古自治区教育厅“研究生精品课程建设”项目的支持，得到内蒙古大学学校和物理科学技术学院鼎力支持；科学出版社高教数理

分社昌盛社长、罗吉编辑及其他同仁为本书第二版的出版做了大量卓有成效的工作；本书的出版同样还凝聚着“热物理系列课程”教学团队同事的智慧和心血.专此一并致谢!

梁希侠

2018年1月

第一版前言

本书的雏形是笔者为理论物理、凝聚态物理两专业硕士研究生讲授“量子统计与多粒子理论”的讲义. 经过在十几年授课过程中的不断修改、补充，形成了今天这个本子，终与读者见面. 统计物理学是现代物理的重要组成部分. 我国学位制度建立伊始，“量子统计与多粒子理论”就被确定为物理专业硕士研究生的学位课. 其内容主要包括量子统计物理的基本理论和统计物理中的格林函数方法两大部分，又统称为“高等统计物理”. 由于研究方向、学生状况、师资力量等诸多因素的不同，国内各校对“高等统计物理”课的教学安排模式各异. 归纳之，大体可分为两类：一类是将上述内容分设为“量子统计”“多粒子理论”(或“统计物理中的格林函数”)两门课程. 这种模式安排的内容和学时较多，涉及一些专题，从不同的侧重点对部分内容提出稍高要求，供不同研究方向的学生选择. 另一类则是将两部分内容合为一门课程讲授，所用的总学时较少，适应面亦宽，多着重基础知识教学. 目前我国国内出版的高等统计物理教学用书不多，适用于上述后一种教学计划的则更少. 笔者讲授这门课程采用了合二而一的教学计划，本书也正是为这种模式的需要而编写的. 同时，我们也希望本书能为需要通过自学而获得相应知识的朋友提供一个简明的读本，为从事物理学和现代应用技术研究的实际工作者提供一本便于翻阅的参考书.

全书分为三编，共十章，可安排72学时讲授. 第一编包括四章，系统地阐述量子统计力学的基本理论. 从经典到量子，着重于量子体系，以微正则系综为基本假设，进而导出正则、巨正则系综，较为完整系统地建立统计力学的系综理论. 随之，再将给出的理论分别应用于理想气体和非理想气体，讨论涉及玻色、费米和玻尔兹曼统计的若干典型的实例. 例如，金属和白矮星中的电子气、电子系的磁性质、玻色凝结、非理想气体的物态方程等问题. 结合这些问题，将介绍经典和量子的集团展开、达尔文-否勒法和变分原理等一些基本或常用的方法.

第5、6章合为第二编，集中讨论相变理论. 20世纪下半叶，特别是近二十年来，统计物理学的理论和研究方法有了很大的进展. 以威尔逊为代表的一批学者所发展的重整化群理论从根本上改变了相变理论研究工作长期徘徊之局面. 同时，这个理论还应用到如多体论、混沌、无序系、分形等物理学的其他领域. 本编将在讨论连续相变传统理论的基础上，围绕临界指数的计算，介绍标度律和重整化群理论.

最后四章构成本书的第三编，讲述统计物理中的量子场论方法，即格林函数理论. 作为量子场论的预备知识，首先简要地介绍二次量子化方法. 在此基础上，分别就零温和有限温度情形引入描述粒子传播特征的格林函数，并阐明其物理意义. 为了实现格林函数的计算，还将证明维克定理，给出费曼图、戴逊方程等多粒子理论的重要概念，介绍简化计算的各种重整化方法. 本编的目的旨在使读者对多体系的格林函数理论有一个基本的了解，为进一步学习和运用这一理论奠定基础. 基于这样的考虑，内容仅限于单粒子格林函数，更多的应用实例也没有涉及.

根据研究生课程安排的实际情况，本书讨论的范围仅限于平衡态统计，没有涉及关于非平衡态(或者说不可逆过程)的理论. 事实上，非平衡统计物理在近二十多年来同样取得了很多令人瞩目的成就，以致使其本身已经形成一门内容非常丰富的独立的课程.

作为一本“导论”，本书的写作多着墨于基本理论和基本方法，取材限于量子统计力学和格林函数理论的最基本内容，体系力求统一完整，文字尽量简明易读. 作为一本基础教程，本书没有触及更多的应用专题，只是适当选择一些典型例子，验证、说明、演示所讲述的理论，以通过剖析实例来加深概念理解，促进方法掌握. 为了便于阅读和自学，在本书的撰写中注意了理论的自洽、概念的规范、符号的统一. 同时，我们还适度降低书的起点，以拓宽其读者面.

阅读本书只需熟悉热力学理论，掌握量子力学基本知识，了解统计物理的初等概念. 当然，基本的微积分和概率论知识对于学习统计力学也是不可或缺的. 上述这些背景，对于物理类本科专业的毕业生来说是不言而喻的.

限于水平，囿于涉猎，书中错误与缺欠定不鲜见，敬请读者提出宝贵意见. 如果本书能为读者温习或自学本课提供一点参考，为进一步学习统计力学的有关专题和在工作中应用这门学科的基本方法略有“导论”作用，笔者将十分欣慰.

本书的前身曾作为试用讲义于1986年、1990年两次印刷. 张渝生、孙震同志为讲义的最初印刷做了大量工作，班士良同志在参与教学实践的同时，为本书的编写提出很多宝贵意见，并为胶版讲义绘制了全部插图. 对此，笔者表示衷心的感谢.

本书的出版得到内蒙古大学出版基金的资助，专此鸣谢.

在本书的编写、试用和出版过程中，还得到很多同仁的帮助，在此一并致谢.

梁希侠

1999年12月

目　　录

第二编 统计力学的量子场论方法

第一编
统计力学的基本理论

第 1 章 经典统计系综理论

研究热现象的理论可分为宏观与微观两类. 宏观理论即热力学，是一种唯象理论. 它以根据大量实验事实总结出的基本热力学定律为基础. 这些定律主要有三条，即所谓热力学三大定律. 它们描述了宏观热现象所遵从的基本规律，其正确性直接或间接地被长期的实践和无数实验事实证实. 热力学从这些定律出发，通过演绎推理获得结论，从而解释自然界发生的热现象和实验观测结果，预测新的物理和化学现象. 热力学理论是一种普遍正确的理论，但它不能预言具体物质的性质. 欲得知具体物系的性质，还需要借助某些热力学函数(如物态方程)的实验观测结果.

关于热现象的微观理论是统计物理学. 运用统计物理理论不仅能够得出热力学的一般定律，而且可以导出特定体系的具体热力学函数. 与描述热现象的唯象理论“热力学”相比，“统计物理学”是更深刻地揭示宏观热现象之运动本质的理论. 通常，人们习惯地将以宏观体系与时间无关的性质，即平衡态或经历可逆过程时的现象为主要研究对象的统计物理理论称为统计力学. 作为一本关于统计力学的简明教程，本书主要介绍描述平衡态的理论. 关于描述体系性质随时间变化的非平衡态理论，通常会在另外的课程中专门讲授，这里不涉及.

统计物理学将宏观体系视为由大量粒子组成的力学系，用概率论分析这种力学体系的运动状态，由统计规律性得出其宏观性质. 对于力学体系运动状态的描述，根据不同情况，可以分别采用经典力学和量子力学. 基于对力学运动描述方式的不同，统计力学的理论可分为经典统计理论和量子统计理论. 我们知道，经典力学是量子力学在特殊情形下的极限, 所以，经典统计力学也是量子统计力学的经典极限. 本书主要讨论量子统计力学. 事实上，从“统计”的角度来看，两种理论并无本质的不同. 为了便于理解，在介绍统计力学的量子理论之前，回顾经典统计力学的基本知识是有益的.

1.1 热力学基本定律

统计力学由最简单的基本假设出发，推演出物体系的热学性质. 其正确性首先可由实验总结出的热力学定律给予证实. 同时，在运用统计物理理论导出物系的热力学性质时，必然反复引用这些定律和由它们导出的基本热力学关系. 为此，我们先将其简要罗列于此.

1. 热力学定律

热力学的主要理论基础是由实验总结出的四个定律，现分别加以叙述.

热力学第零定律即热平衡定律，简要表述为：**无外界影响时，分别与第三系统热接触而性质不变的两个系统，彼此热接触必处于热平衡**. 此定律为准确定义和测量温度提供了理论依据，是建立热力学理论的基础.

热力学第一定律即能量守恒定律，可以表述为：**永动机(或称第一类永动机)是造不成的**. 用 E 表示物系内能，用 $đQ$ 表示某微过程中物系由外界吸收的热量，用 $đW$ 表示外界对物系做的功，热力学第一定律便可表述为如下数学公式：

$$\mathrm{d}E = đQ + đW. \tag{1.1.1}$$

热力学第二定律给出了过程进行的方向. 这一定律有多种表述方式，此处不拟赘述. 简而言之，可表述为：**第二类永动机是造不成的**. 所谓第二类永动机，即从单一热源吸热，使之完全变为有用功而无其他影响的热机. 这一定律引出一个名曰**熵**的态函数，记作 S. 利用熵的概念，第二定律又可表述为如下数学形式：

$$\mathrm{d}S \geqslant \frac{đQ}{T}, \tag{1.1.2}$$

其中等号为可逆过程. 此式名为克劳修斯(Clausius)不等式.

对于由两个独立参数描述的均匀系(常称为简单均匀系)，假定外界对物系只做压缩功，则可写为

$$đW = -P\mathrm{d}V.$$

运用克劳修斯不等式，再将第一定律代入，对可逆过程则有以下微分公式：

$$T\mathrm{d}S = \mathrm{d}E + P\mathrm{d}V. \tag{1.1.3}$$

这里，T、P 和 V 分别是物系的温度、压强和体积. 式(1.1.3)结合热力学第一和第二定律，是热力学的基本微分式.

热力学第三定律指出：**绝对温标的零度不可达到**. 或者说：不能通过有限的手续将物系的温度降至绝对温标零度. 这一定律还可用**能斯特(Nernst)定理**来表述，其数学形式是

$$\lim_{T\to 0}(\Delta S)_T = 0, \tag{1.1.4}$$

即处于平衡态的凝聚系等温熵变随绝对温度趋零而趋于零. 由此可以定义绝对熵(以绝对零度为零点的熵)，从而使熵的数值完全确定.

2. 热力学势

为了便于计算热力学函数，进一步研究宏观体系的热力学性质，热力学中引入了“热力学势”的概念. 热力学势的概念颇有几分类似于力学中弹性势能、电

学中的电势能. 可以这样理解：热力学系也储存着某种“势能”，释放这种“势能”可以做功. 这些“势能”可以用多种不同的热力学函数描述，我们称这些函数为热力学势(或称特性函数). 取不同的独立变数组合(即不同的约束形式)，对应着不同形式的热力学势. 只要获得热力学势与相应独立变数间的函数关系，便可通过微商求得所有热力学函数. 最常用的热力学势，如内能 E、焓 H、自由能 F、吉布斯函数 G 和巨势 Ω(广势函数).

描述简单均匀系的热力学基本微分式(1.1.3)可以推广到粒子数可变的开放系. 这时，若记粒子数为 N，化学势为 μ，热力学基本微分式右端增加一个描述粒子数变化贡献的项，方程便成为

$$T\mathrm{d}S = \mathrm{d}E + P\mathrm{d}V - \mu\mathrm{d}N. \tag{1.1.5}$$

内能的微分式则为

$$\mathrm{d}E = T\mathrm{d}S - P\mathrm{d}V + \mu\mathrm{d}N. \tag{1.1.6}$$

由此式易证，E 是以 S、V、N 为独立变数的热力学势.

定义焓

$$H \equiv E + PV, \tag{1.1.7}$$

代入式(1.1.6)可得

$$\mathrm{d}H = T\mathrm{d}S + V\mathrm{d}P + \mu\mathrm{d}N, \tag{1.1.8}$$

可见 H 是以 S、P、N 为独立变数的热力学势.

类似地，分别定义自由能、吉布斯函数和广势函数

$$F = E - ST, \qquad G = H - ST, \qquad \Omega = -PV, \tag{1.1.9}$$

将自由能代入基本微分式可得

$$\mathrm{d}F = -S\mathrm{d}T - P\mathrm{d}V + \mu\mathrm{d}N, \tag{1.1.10}$$

于是有

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N}, \qquad P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N}, \qquad \mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V}.$$

可见，自由能 F 是以 T、V、N 为独立变数的热力学势. 对吉布斯函数有

$$\mathrm{d}G = -S\mathrm{d}T + V\mathrm{d}P + \mu\mathrm{d}N, \tag{1.1.11}$$

可得

$$S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{P,N}, \qquad V = \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_{T,N}, \qquad \mu = \left(\frac{\partial G}{\partial N}\right)_{T,P}.$$

吉布斯函数 G 是以 T、P、N 为独立变数的热力学势. 对广势函数有

$$\mathrm{d}\Omega = -S\mathrm{d}T - P\mathrm{d}V - N\mathrm{d}\mu, \tag{1.1.12}$$

可得

$$S=-\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right)_{V,\mu}, \qquad P=-\left(\frac{\partial \Omega}{\partial V}\right)_{T,\mu}, \qquad N=-\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T,V}.$$

作为 T、V、μ 的函数，广势函数 Ω 是热力学势.

在以后的讨论中，我们将更多地用到 F、Ω 为热力学势的性质.

1.2 微正则系综

我们知道，统计物理学依据的基本原理是：宏观量为相应微观量之统计平均. 为便于数学上实现“统计平均”，引入统计系综(以下简称系综)概念，用系综平均的方法计算统计平均. 本节先介绍最简单、最基本的系综——微正则系综.

1. 统计系综

统计系综的定义为：

处于相同宏观条件的大量(极限情形为无穷多)完全相同且以一定概率处在各微观状态的力学体系的集合谓之统计系综.

在经典统计力学中，常用“**相宇**”(相空间)描述系综的行为，它是以力学系所有广义坐标和广义动量作为分量建立的几何空间. 相宇中的一点(q_1，q_2，…，q_s；p_1，p_2，…，p_s)代表 s 个自由度的力学系的一个微观状态，以下简单地记为(q, p). 在某一时刻，系综中各力学系以一定概率所处的各微观状态可用相宇中一系列点来代表，这些点的分布给出系综的分布. 将 t 时刻力学系之代表点处在相宇中体积元 $\mathrm{d}\Gamma=\mathrm{d}q\mathrm{d}p$ 内的概率记为

$$\mathrm{d}W=\rho(q,\ p,\ t)\mathrm{d}\Gamma, \tag{1.2.1}$$

其中 $\rho(q,\ p,\ t)$是系综的分布函数，它与时间 t 有关. 当体系处于平衡态时，系综的分布不随时间变化，ρ 的表达式中不显含时间.

由力学系的微观状态确定的物理量称为微观量，它可以表示为力学系广义坐标和广义动量的函数. 任一微观量 $u(q,\ p,\ t)$的统计平均由下式给出：

$$\overline{u}=\int u\rho\mathrm{d}\Gamma \Big/ \int \rho\mathrm{d}\Gamma. \tag{1.2.2}$$

如果 ρ 满足归一化条件

$$\int \rho\mathrm{d}\Gamma=1,$$

平均值式(1.2.2)便写成

$$\overline{u} = \int u\rho \mathrm{d}\Gamma . \tag{1.2.3}$$

由上面的讨论可知，通过分析体系的微观力学运动求得其热学性质的关键是给出系综的分布函数，即系统对各种可能的微观态之占据概率的分布. 不难想象，这种分布应该受体系宏观约束条件的制约，即所处的宏观约束不同，或者说平衡条件不同，其系综分布也将不同.

2. 基本假设——微正则系综

首先考虑一种最简单的情形——孤立系，即物系与外界既不交换粒子，也不传递能量. 此类体系之所有可能微观态均分布在相宇中能量为物系的确定能量的等能面上. 统计力学的**基本假设是:孤立系的系综在相宇中等能面上分布均匀**. 这就是说，孤立系处在各可能的微观状态之概率相同，因此又称为等概率假设. 具有此种分布的系综称为**微正则系综**，相应的分布则称为**微正则分布**. 将力学系的哈密顿量记为 H(应当注意将它与 1.1 节的焓区别),相宇中能量为 E 的等能面之方程则为

$$H(q, p) = E\ (\text{常数}).$$

根据基本假设,微正则系综的分布函数在等能面上为一常数,在等能面外为零. 为便于数学处理，我们先将等能面开拓为一能量范围为 ΔE 的壳层，计算的最后再令壳层的能量间隔趋于零，即

$$E \leqslant H \leqslant E + \Delta E \quad (\Delta E \to 0).$$

这样，微正则系综的分布则可写为

$$\rho(q,p) = \begin{cases} C, & E \leqslant H \leqslant E + \Delta E \qquad (\Delta E \to 0) \\ 0, & \text{其他情形}. \end{cases} \tag{1.2.4}$$

式中常数 C 由归一化条件确定. 式(1.2.4)将等能面开拓为能量壳层，这一壳层在相宇中的体积(相体积)为

$$\Gamma(E) = \int_{\Delta E} \mathrm{d}\Gamma . \tag{1.2.5}$$

相应的归一化条件可写为

$$\lim_{\Delta E \to 0} \int_{\Delta E} C \mathrm{d}\Gamma = \lim_{\Delta E \to 0} C\Gamma(E) = 1 ,$$

因此

$$C = \Gamma^{-1}(E) \tag{1.2.6}$$

利用 δ 函数将式(1.2.5)的积分开拓到整个相宇，即

$$\Gamma(E) = \int \delta(H - E)\,\mathrm{d}\Gamma \tag{1.2.7}$$