量子統计学

53-3

H. H. 波戈留波夫著

量子統計学

H. H. 波戈留波夫著
楊　棨　譯

科 學 出 版 社

Н. Н. БОГОЛЮБОВ
ЛЕКЦІЇ З КВАНТОВОЇ СТАТИСТИКИ
ДЕРЖАВНЕ УЧБОВО-ПЕДАГОГІЧНЕ
ВИДАВНИЦТВО "РАДЯНСЬКА ШКОЛА"
Київ 1949

內容簡介

本書系統地叙述了量子統計学的基础,并且詳細叙述了二次量子化方法。書中將二次量子化方法与統計算符的理論緊密地結合起来,使得二次量子化方法变得相当簡單而明瞭。

書中有很大篇幅叙述量子統計学和二次量子化的应用：超流現象的分子理論和金屬的極性模型。在超流理論中作者从分子理論的观点証实了藍道的半唯象理論,并給出了玻色系統的超流条件。在金屬極性理論中,作者發展了一些新的方法,它对固体理論有很大的價值;最后还指出了这个理論对鉄磁理論的应用。

本書的極大部分是根据作者本人及其共同工作者所做的工作写成的。本書适合綜合大学物理系理論物理專业高年級学生和科学研究工作者參考。

量 子 統 計 学

Н. Н. 波戈留波夫著
楊 棨 譯

*

科学出版社出版(北京朝陽門大街117号)
北京市書刊出版業營業許可証出字第061号
中国科学院印刷厂印刷　新华書店总經售

*

1959年10月第一版　書号：1872　字数：189,000
1959年10月第一次印刷　开本：850×1168 1/32
(京)0001—7,500　印張：6 1/2

定价：0.96元

序　言

（为中譯本而作）

听說本書要出中譯本，很感高兴．从这書的烏克兰文初版問世以来，不覺已經九年．在这九年中，書中所叙述的各种近似二次量子化方法已有了重要的發展，并在不少方面，特别是在鉄磁和反鉄磁現象的研究方面，得到了应用．曾經發現，这些方法和重要圖解[1]的求和方法有联系．

不久以前曾經闡明，为玻色系統的超流理論所建立的近似二次量子化方法（見第三章，§5），也能应用到超导問題上去．关于此点，本書作者和 В. В. 多尔瑪巧夫（Толмачёв）及 Д. В. 雪尔可夫（Ширков）已共同完成了一篇超导理論方面的研究报告，不久将由科学出版社另行出版中譯本．

作者借此机会对翻譯本書的楊棨同志表示感謝；同时也衷心感謝中国科学出版社惠予出版．

Н. Н. 波戈留波夫

1958年4月于莫斯科

1）指量子場論中的費曼圖解（Feynman diagram）——譯者注．

01668

前　言

近年来在量子系統的統計力学中創立了不少有效的新方法。这里我們主要是指分子的配容（комплекс）統計算符方法和与其密切有关的近似二次量子化方法。

但到目前为止这些問題还只是在科学杂志中有文論述。在本書內我們初步尝試有系統地来叙述这些方法的基础及其应用。我們把主要的注意力放在超流現象的分子理論及金屬的極性模型理論上。

为了讀者方便起見，在本書內也加入了量子統計学的緒論及二次量子化方法各一章。在叙述二次量子化方法时，我們不按普通的講法，而把它和統計算符理論联系了起来；这样可以使叙述变得簡單而又明瞭。

本書基本上是根据作者近年来在莫斯科和基輔二大学主講的統計物理專門化課程的材料写成的。

H. 波戈留波夫

1948年12月30日

目 录

序言(为中譯本而作) …… i

前言 …… ii

第一章 量子統計学的基本定义 …… 1

§1. 量子系統統計力学的基本原理 …… 1

§2. 絕热过程;热力学函数 …… 11

§3. 分子的配容統計算符 …… 14

§4. 对單原子无自旋分子系統的应用 …… 25

第二章 二次量子化方法 …… 32

§1. 波函数的二次量子化表象 …… 32

§2. 力学变量的二次量子化表象 …… 37

§3. 玻色統計律情形 …… 42

§4. 費米統計律情形 …… 50

§5. 二次量子化方法和統計算符方法的关系 …… 56

第三章 玻色-爱因斯坦气体理論及超流現象 …… 58

§1. 理想的玻色-爱因斯坦气体 …… 58

§2. 在动量空間中的凝結現象和超流 …… 65

§3. 兰道超流理論的基本原理 …… 74

§4. 应用微扰理論来計算非理想的玻色-爱因斯坦气体的能級 …… 77

§5. 近似二次量子化方法及超流理論 …… 85

第四章 金屬的極性模型理論 …… 97

§1. 極性模型特征方程的二次量子化表象 …… 97

§2. 原子單电子函数的正交化 …… 106

§3. 金屬的極性模型和能帯理論 …… 115

§4. 哈密頓量按微参量之冪的展开 …… 120

§5. 簡并性能級的微扰理論 …… 125

§6. 对特征方程之应用 …… 131

§7. 一次及二次近似 …… 136

§8. 与海脫勒-倫敦方法之連系 …… 140

§9. 三次近似；电流公式……………………………………………147
§10. 物理解釋 ……………………………………………………162
§11. 近似二次量子化方法 …………………………………………171
§12. 对鉄磁理論的应用 ……………………………………………192

第一章

量子統計学的基本定义

§1. 量子系統統計力学的基本原理

在量子力学里力学系統状态的变化和在經典力学里一样是按照一定的法則进行的. 在起始时刻 t_0 的起始状态完全决定此系統在以后各时刻的状态.

經典力学和量子力学基本不同之点就在于怎么建立"力学系統的状态"这一个概念.

在經典力学里，有 n 个自由度的力学系統的状态是由其 n 个座标和 n 个动量——$q_1, \cdots, q_n; p_1, \cdots, p_n$——来决定的. 状态在时間里的变化則由下列正則方程式来决定:

$$\frac{dq_k}{dt}=\frac{\partial H}{\partial p_k};\quad \frac{dp_k}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial q_k};\quad k=1,2,\cdots,n$$

这里 H 是系統的哈密頓函数. 在系統和外界影响隔絕时，H 不明显地含有 t:

$$H=H(q_1, \cdots, q_n, p_1, \cdots, p_n).$$

在量子力学里力学系統的状态由对应的波函数 Ψ 来决定，而它的变化則由波动方程式来表示:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=H\Psi, \tag{1,1}$$

其中哈密頓算符 H 是自共軛的算符，它作用在 Ψ 函数上.

举例来說，如果系統由 n 个相同的粒子組成，而这些粒子又都在一个普通三度空間的場里运动，場的位能用 $V(q_1, \cdots, q_n)$ 来表示[1]，則波函数可以看作是 $q_1, \cdots, q_n$ 及时間 t 的函数，而方程式

1) 我們以后用字母右上角的足数来表示笛卡兒座标. 例如，$q_j^\alpha(\alpha=1, 2, 3)$表示粒子 j 的笛卡兒座标.

(1,1)的展开就是：

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\sum_{(1\leqslant j\leqslant n)}\Delta_{q_j}+V(q_1,\cdots,q_n)\right\}\Psi,$$

其中 Δ_{q_j} 表示拉普拉斯 (Laplace) 算符，例如

$$\Delta_{q_j}=\sum_{(1\leqslant\alpha\leqslant 3)}\frac{\partial^2}{\partial q_j^{\alpha 2}},$$

μ 是一个粒子的質量，$\hbar$ 是被 2π 除过后的普朗克 (Planck) 常数.

可見，只要給出在起始时刻 t_0 时的 Ψ，方程式(1,1)就完全决定 Ψ 在任意时刻 t 时的数值.

如果系統和外界隔絕，那末 H 就不明显地含有 t，我們就得到：

$$\Psi(t)=e^{\frac{H}{i\hbar}(t-t_0)}\Psi(0).$$

"力学系統的狀态"在量子力学和經典力学里的不同意义在考虑力学变量（能量、質点的座标、动量、动量矩等）时会明显地表現出来.

在經典力学里力学变量是系統的座标和动量的函数，因此也就是力学系統狀态的函数. 所以系統的狀态就完全可以决定力学变量. 但是在量子力学里力学变量并不是狀态的函数（在量子力学里狀态是用波函数 Ψ 来表示的），而是用一些作用在 Ψ 上的自共軛算符来描写的.

所以，准确地給出力学系統的狀态，或者說准确地給出对应的波函数 Ψ，一般地并不决定在測量某一个力学变量时所得的数值. 只有当这个 Ψ 函数是代表某一个力学变量的算符 A 之本征函数时，也就是說，如果：

$$A\Psi=a\Psi$$

（a 是普通的数），在測量 A 时方能够得到一定的数值 a.

在一般的情形下，波函数只給出各种不同的測量結果的或然率.

因此，波函数只能使我們对力学变量的各个不同数值作統計

性的預測，而且只有在独立地重复了相当次数同一个測量后，才可以判断这个預測的可靠性.

为了更清楚地来了解这些“独立的測量”，我們引入“純粹系綜”这一个概念. “純粹系綜”是本力学系統 N 个独立“副本”的总体，它們互相不作用，每个都处在 Ψ 状态，而 N 又趋向无穷大.

应用“純粹系綜”的概念，多次独立地測量某一个力学变量 A 可以看作是对这个“系綜”里的个别副本作这个量的測量.

量子力学原理之一就是：在波函数是 Ψ 的純粹系綜里力学变量 A 的平均值

$$\overline{A}=\frac{A_1+\cdots+A_N}{N}$$

当 N 趋向无穷大时等于以下标积[1]：

$$\overline{A}=(\overset{*}{\Psi},A\Psi).$$

应該估計到，在很多情形下重复測量的时候系統显然要改变其状态. 所以量子力学同时也考虑更一般的統計系綜，或者叫做“混合系綜”. “混合系綜”也是由本力学系統的 N 个独立副本組成，但其中各个副本可以处在不同的状态中.

假定在 N 中 N_1 个系統处在状态 Ψ_1 中，N_2 个处在状态 Ψ_2 中，以此类推. 这个統計系綜可以由 Ψ_1, Ψ_2, … 等波函数描写，各有各的或然率：$w_1=\frac{N_1}{N}$, $w_2=\frac{N_2}{N}$, … 等等，而这些或然率的总和等于1：

1) 二个波函数的标积按以下公式决定：

$$(\overset{*}{\Psi},\varphi)=\sum_{(x)}\overset{*}{\Psi}(x)\varphi(x),$$

式內的求和按 x 的不連續譜进行，如果譜是連續的話，那末求和就被积分来代替. 譬如說，系統由具有自旋的質点組成，对这个系統的波函数

$$\Psi(q_1,\cdots,q_n,\sigma_1,\cdots,\sigma_n),$$

标积就同时由积分及求和組成——对三度欧氏空間点 $q_1,\cdots,q_n$ 的积分，及对不連續的自旋变量 $\sigma_1,\cdots,\sigma_n$（自旋的 z 軸投影）的求和：

$$(\overset{*}{\Psi},\varphi)=\sum_{(\sigma_1,\cdots,\sigma_n)}\int\overset{*}{\Psi}(q_1,\cdots,q_n,\sigma_1,\cdots,\sigma_n)\varphi(q_1,\cdots,q_n,\sigma_1,\cdots\sigma_n)dq_1,\cdots,dq_n.$$

这里，符号“*”表示复数共軛.

$$w_1+w_2+\cdots=1.$$

显而易見，对这样的系綜来說，力学变量 A 的平均値由以下公式决定：

$$\overline{A}=\sum_{(k)}w_k(\overset{*}{\Psi}_k, A\Psi_k).$$

可以証明，在一般的情形下，統計系綜完全可以由所謂"統計算符"来描写．統計算符的概念首先是由 Л. Д. 兰道（Ландау）建立的．

先引入一个概念："投影算符" P_φ．它把任意波函数投影到函数 φ 上，这就是說，像在普通的矢量空間中一样，投影算符 P_φ 把任何一个波函数 Ψ 变成 $c\varphi$，并且常数 c 由 φ 和 $\Psi-P_\varphi\Psi$ 的正交条件来决定：

$$(\overset{*}{\varphi}, (\Psi-P_\varphi\Psi))=0.$$

因此，按定义：

$$P_\varphi\Psi=c\varphi,$$

其中：

$$c=\frac{(\overset{*}{\varphi}, \Psi)}{(\overset{*}{\varphi}, \varphi)}.$$

如果波函数 φ 是归一化了的，那末：

$$c=(\overset{*}{\varphi}, \Psi).$$

以后我們永远假定 φ 是归一的．

令某統計系綜由一組可能的状态 Ψ_k 和其相对应的或然率 w_k 来描写．那末下列算符：

$$\rho=\sum_{(k)}w_kP_{\Psi_k}$$

就叫做統計算符．为了考虑这个統計算符的矩陣表象，我們考虑本力学系統的某些能同时被观察的量，并且这些量还組成一个完整組．这些量的譜用 x 来表示．

Ψ 可以看作是 x 的函数：$\Psi=\Psi(x)$，并且在这个 x-表象里：

$$\sum_{(x')}(P_\varphi)_{x,x'}\Psi(x')=(P_\varphi\Psi)_x=(\overset{*}{\varphi}, \Psi)\varphi(x).$$

按标积的定义：

$$(\overset{*}{\varphi}, \Psi)=\sum_{(x')}\overset{*}{\varphi}(x')\Psi(x'),$$

所以：

$$\sum_{(x')}\{(P_\varphi)_{x,x'}-\overset{*}{\varphi}(x')\varphi(x)\}\Psi(x')=0.$$

因为 $\Psi(x')$ 是任意函数，所以投影算符的 x-表象可以用以下矩陣写出：

$$(P_\varphi)_{x,x'}=\varphi(x)\overset{*}{\varphi}(x').$$

而統計算符的 x-表象就是以下矩陣：

$$(\rho)_{x,x'}=\rho(x,x')=\sum_{(k)}w_k\Psi_k(x)\overset{*}{\Psi}_k(x').$$

現在引入算符之"迹"的概念．一个算符 A 的矩陣对角元之和

$$\sum_{(x)}(A)_{x,x}$$

叫做这个算符的"迹"幷用 $\mathrm{Sp}(A)$ 来表示．

單按定义来看，算符的"迹"好像是由一定的矩陣表象来决定的，但很容易証明，"迹"的数値和表象无关．

的确，当我們把一个 x-表象变换成另一个 n-表象时(令 n-表象里用的正交归一函数系是 $\varphi_n(x)$)：

$$(A)_{x,x'}=\sum_{(n,n')}\varphi_n(x)(A)_{n,n'}\varphi_{n'}(x').$$

由此可得：

$$(A)_{x,x}=\sum_{(n,n')}(A)_{n,n'}\overset{*}{\varphi}_{n'}(x)\varphi_n(x).$$

所以：

$$\sum_{(x)}(A)_{x,x}=\sum_{(n,n')}(A)_{n,n'}\sum_{(x)}\overset{*}{\varphi}_{n'}(x)\varphi_n(x)=\sum_{(n,n')}(A)_{n,n'}(\overset{*}{\varphi}_{n'},\varphi_n).$$

但因函数系 φ_n 是正交归一的，所以：

$$\sum_{(x)}(A)_{x,x}=\sum_{(n)}(A)_{n,n},$$

这也就証明了算符之迹和应用的表象无关．

順带注意到一点：自共軛算符經常可以写成对角表象，所以自共軛算符的迹也就等于它的本征值的和．

現在把迹的概念应用到統計算符上去．鑒于 ρ 的自共軛性，$\mathrm{Sp}\rho$ 就等于或然率 w_k 的和1，也就是說：

$$\mathrm{Sp}\rho=1.$$

其次，

$$(A\rho)_{x,x'}=\sum_{(k)}w_k\overset{*}{\Psi}_k(x')(A\Psi_k)_x.$$

由此可得:

$$\sum_{(x)}(A\rho)_{x,x}=\sum_{(k,x)}w_k\overset{*}{\Psi}_k(x)(A\Psi_k)_x=\sum_{(k)}w_k(\overset{*}{\Psi}_k,\ A\Psi_k).$$

可見，对一个波函数是 $\cdots\Psi_k\cdots$，对应的或然率是 $\cdots w_k\cdots$ 的統計系統来說，任何力学变量 A 的平均值 $\overline{A}$ 等于:

$$\overline{A}=\mathrm{Sp}A\rho.$$

所以，知道統計算符 ρ 后，就可以計算出任何力学变量的平均值.

在量子力学的范圍內，这个結果已經是我們所能得到的最詳尽的情报，因此完全可以用統計算符来描写統計系綜.

除此以外，还应該指出，用統計算符来描写力学系統要比用波函数来描写更有普遍性.

的确，如果

$$\rho=P_\varphi,$$

那末

$$\mathrm{Sp}A\rho=\sum_{(x)}(A\rho)_{x,x}=(\overset{*}{\varphi},A\varphi).$$

这就是說，在这种情形中平均值是按一个波函数来計算的，也就是說，我們的系綜是一个純粹系綜. 另一方面，按定义，純粹系綜的統計算符永远等于投影算符. 所以，只有当統計算符等于投影算符时才可以用一个波函数来描写系綜的狀态.

到現在为止，我們只考虑了在某一个固定时刻 t 的統計系綜和它的統計算符 ρ.

現在讓我們来考虑它們在时間里的变化.

因为組成系綜的各个力学系統互相不起作用，所以可以單独考虑个别系統的变化.

令某系統在起始时刻处在 $\Psi_k(0)$ 狀态. 在时刻 t 这系統就处在 $\Psi_k(t)$ 狀态. 这 $\Psi_k(t)$ 狀态按波动方程式随时間而变化:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_k(t)}{\partial t}=H\Psi_k(t),$$

或者用矩陣表象:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_k(t,x)}{\partial t}=\sum_{(x')}H_{x,x'}\Psi_k(t,x'). \tag{1,2}$$

在統計系綜里起始时刻处在 $\Psi_k\ (0)$ 状态的力学系統之相对数量是 w_k，在 t 时刻处在 $\Psi_k(t)$ 状态的力学系統之相对数量还是 w_k。所以：

$$\rho(t)=\sum_{(k)} w_k P_{\Psi_k(t)},$$

或者用矩陣表象：

$$\rho(t,\ x,\ x')=\sum_{(k)} w_k \Psi_k(t,\ x)\overset{*}{\Psi}_k(t,\ x')。$$

由此可得：

$$i\hbar\frac{\partial\rho(t,\ x,\ x')}{\partial t}=\sum_{(k)} w_k i\hbar\frac{\partial\Psi_k(t,\ x)}{\partial t}\overset{*}{\Psi}_k(t,\ x')+$$

$$+\sum_{(k)} w_k\Psi_k(t,\ x)\, i\hbar\frac{\partial\overset{*}{\Psi}_k(t,\ x')}{\partial t}。$$

由于哈密頓量是自共軛的：

$$\overset{*}{H}_{x,x'}=H_{x',x},$$

从(1,2)式可得：

$$-i\hbar\frac{\partial\overset{*}{\Psi}_k(t,\ x)}{\partial t}=\sum_{(x')}\overset{*}{H}_{x,x'}\overset{*}{\Psi}_k(t,\ x')=\sum_{(x')}\overset{*}{\Psi}_k(t,\ x')H_{x',x},$$

因此可写下式：

$$i\hbar\frac{\partial\rho(t,\ x,\ x')}{\partial t}=\sum_{(x'',k)} H_{x,x''}w_k\Psi_k(t,\ x'')\overset{*}{\Psi}_k(t,\ x')-$$

$$-\sum_{(x'',k)} w_k\Psi_k(t,\ x)\overset{*}{\Psi}_k(t,\ x'')H_{x'',x'},$$

或用算符形式：

$$i\hbar\frac{\partial\rho(t)}{\partial t}=H\rho(t)-\rho(t)H。\qquad(1,3)$$

値得指出，上列方程式和經典力学里的配布函数变化方程式之間有深刻的形式上的类似。

众所周知，在經典力学里統計系綜由配布函数来描写：

$$\rho(t,\ q_1,\ \cdots,\ q_n,\ p_1,\ \cdots,\ p_n),$$

其意义在于：以下乘积

$$\rho(t,\ q_1,\ \cdots,\ q_n,\ p_1,\ \cdots,\ p_n)dq_1\cdots dq_n dp_1\cdots dp_n$$

等于系綜內某些系統的相对数量，这些系統的状态在时刻 t 都处

在$(q_1,\cdots,q_n;p_1,\cdots,p_n)$附近的一个无穷小間段$dq_1\cdots dq_n dp_1\cdots dp_n$内.

配布函数服从以下方程式:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=\sum_{(1\leqslant s\leqslant n)}\left\{\frac{\partial H}{\partial q_s}\frac{\partial\rho}{\partial p_s}-\frac{\partial H}{\partial p_s}\frac{\partial\rho}{\partial q_s}\right\},$$

此方程式可用經典泊松(Poisson)括号

$$[A;B]=\sum_{(1\leqslant s\leqslant n)}\left\{\frac{\partial A}{\partial q_s}\frac{\partial B}{\partial p_s}-\frac{\partial A}{\partial p_s}\frac{\partial B}{\partial q_s}\right\}$$

改写成:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=[H;\rho].$$

显而易見,如果采用量子泊松括号

$$[A;B]=\frac{AB-BA}{i\hbar},$$

量子方程式(1,3)也能写成同样的形式.

量子力学里的統計算符和經典力学里的配布函数之間的类似还不止如此,这个类似还在計算力学变量平均値时表現出来.

在經典力学里某一个力学变量

$$A=A(q_1,\cdots,q_n,p_1,\cdots,p_n)$$

按配布函数是ρ的統計系綜所計算的平均値等于:

$$\overline{A}=\int A\,\rho\,dx,$$

其中

$$dx=dq_1\cdots dq_n dp_1\cdots dp_n,$$

而且

$$\int\rho\,dx=1;$$

因为系綜中各系統的相对数量之和当然应該等于1.

在量子力学里对应的公式是:

$$\overline{A}=\mathrm{Sp}(A\rho),$$

$$\mathrm{Sp}\rho=1.$$

但是在看到形式上的类似时絕对不能忘却量子力学和經典力学之間根本上的不同.

回顧 (1, 3) 公式，考慮某个和外界影响隔絕的力学系統．对这样的力学系統来說能量和其他力学变量算符不明显地含有时間 t。

考慮上述系統的統計系綜．这个統計系綜我們用算符 ρ 来描写．从 (1, 3) 公式可以看到，如果

$$H\rho-\rho H=0, \tag{1,4}$$

则 ρ 不明显地含有时間 t．这就是說，任何力学变量的平均值不随时間变化．

在这情形下可以認为，統計系綜的状态不随时間变化．因此凡符合(1,4)式的算符都可称为(1,3)方程式的定态解．

由于关系式 (1, 4) 的可交换性，ρ 和 H 可以形式地看成是二个"可以同时测量的力学变量"，它們有公共的本征函数系．

因此，定态解可以写成以下形式：

$$\rho(x, x')=\sum_{(k)} w_k \varphi_k(x) \overset{*}{\varphi}_k(x'), \tag{1,5}$$

其中 φ_k 是哈密頓量的本征函数：

$$H\varphi_k=E_k\varphi_k.$$

众所周知，在量子力学里并不是哈密頓量的任何本征函数都"允許"作为力学系統的波函数的．

举例說明．如果力学系統由同样粒子組成，则可以有二个不同情形：或者这些粒子服从玻色 (Bose) 統計律，那末被"允許"的波函数只能是对称的；或者这些粒子服从費米 (Fermi) 統計律，那末被"允許"的波函数就只能是反对称的．所謂"对称"和"反对称"，此地是相对于任何二个粒子的置换而言．

所以，如果在 (1, 5) 式中的求和只按对称原則允許的能級进行，則此式就决定了对应于系綜定态的統計算符之普遍形式，式中各能級的或然率 w_k 可按任意方式配布．

在这些不同的或然率配布律中有一个"正則配布律"：

$$w_k=Ce^{-\frac{E_k}{\theta}},$$

(C 和 θ 是正常数)，它具有特別的意义。

用正则配布律可得：

$$\rho(x, x')=C\sum_{(k)}e^{-\frac{E_k}{\theta}}\varphi_k(x)\overset{*}{\varphi}_k(x'). \qquad (1,6)$$

今后認为，ρ 并不作用于任意波函数，而只作用于满足对称原則的波函数. 这样(1,6)式就可写成更簡單的算符形式：

$$\rho=Ce^{-\frac{H}{\theta}}. \qquad (1,7)$$

吉卜斯 (Gibbs) 正則配布律的特别意义在于以下一点. 无論在經典力学或是在量子力学里我們都作一个假定（統計力学在热力学里的应用事实上全部建筑在这个假定的基础上），这个假定可以这样陈述：如果所考慮的力学系統和外界隔絕并且是宏观系統，就是說它由相当多（常称宏观数量）的互相作用的粒子組成，那末所观察到的宏观力学变量趋近于恒量，而且它們的数値等于用(1,7)配布律求出的平均値[1].

簡單地說，系統趋近統計平衡状态.

这个过程所占的时間数量級一般称为“弛豫时間”.

統計力学基本原則的不同措辞非常多，但我們从这些不同的措辞中取了上述的那一个. 原因在于，依我們看来这个措辞最尖銳地强調出了，統計力学基本原則只是一个假定. 这个措辞也最清楚地提出了在証明这个基本原則时需要注意的各点.

从力学的基本定律和宏观系統的分子結构概念出發去証明統計力学基本原則是个很重要而又很复杂的問題. 应該指出，这个問題到現在还沒有解决，因为已有过的几次尝試或者是沒有达到目的（指数学上的“各态經历理論”），或者是用另外一些“显而易見”的假定去代替了基本原則.

还应該指出，在这个問題（統計力学基本原則的証明）的具体

1) 当然，还应該补充假定，力学系統作为整体来看是静止不动的. 在更普遍的情形下，如果除了总能量 H 还要考虑其他“运动积分”：

$$I_1, I_2, \cdots, I_r,$$

（例如系統的总动量分量，动量矩等等），那末(1,7)式应該用以下公式代替：

$$\rho=C\exp\left\{-\frac{H}{\theta}+\sum_{k=1}^{r}\lambda_k I_k\right\},$$

其中 λ_k 是任意常数.