第 43 卷第 10 期
2024 年 10 月

大 学 物 理
COLLEGE PHYSICS

Vol. 43 No. 10
Oct. 2024

巨正则系综处理孤立理想量子系统时的误差展示

胡 健[1],周池春[1],顾 昀[2],陈玉柱[3]

(1. 大理大学 工程学院,云南 大理 871003;2. 天津大学 物理系,天津 300072;3. 天津工业大学 物理系,天津 300387)

摘要:巨正则系综方法是量子统计的重要方法.巨正则系综方法通常用来处理开放系统.巨正则系综方法也常被用作处理孤立系统的近似方法:它使用系综平均粒子数和平均能量近似系统精确粒子数和能量.相较于正则和微正则系综方法,巨正则系综方法能够较为容易的处理全同粒子;作为代价,巨正则系综方法会带来误差.现有结果仅在粒子数趋于无穷时对系统的宏观量的涨落误差有近似的估计.这种误差是用巨正则系综的粒子数分布近似模拟微正则系综的粒子数分布造成的.这个工作中,我们构造了一个可以数值精确求解的孤立系统,并给出微正则系综粒子数分布的精确解和巨正则系综粒子数分布的近似解之间的差别.结果显示:在粒子数很小时,误差较为明显;基态粒子数分布误差要大于激发态;玻色系统的误差要大于费米系统的误差.

关键词:系综;粒子数分布;量子统计

中图分类号:O 414-21 **文献标识码**:A **文章编号**:1000-0712(2024)10-0036-03

【DOI】10.16854 /j.cnki.1000-0712.230048

真实的系统是量子系统.量子系统中全同粒子是不可分辨的.玻色系统中粒子间具有交换对称性,费米系统中粒子间具有交换反对称性[1-4].由于全同粒子效应的存在,使用微正则和正则系综方法处理量子系统非常困难.我们在工作[1,2]中利用正则系综方法给出了理想量子系统的精确解.方法中涉及组合数学中对称函数以及数论中的拆分数等艰涩概念,不适宜在课堂上对初学统计力学的学生进行讲解.

巨正则系综方法是量子统计的重要方法.相较于正则和微正则系综,它能够较为容易的处理全同粒子效应因而普遍被统计教科书使用[5].需要指出的是,如果考虑的对象是孤立系统,那么巨正则系综是一种近似方法:它使用系综平均粒子数和平均能量代替孤立系统的粒子数和能量.巨正则系综在处理全同粒子带来便利的同时,也带来了误差.这种误差本质上是由巨正则系综的粒子数分布与微正则的粒子数分布的误差带来的.这种误差在少体系统中尤为明显.由于微正则系综难以精确求解,这一误差一直未在统计力学课本中明确的展示给学生.

在这个工作中,我们展示处理孤立系统时巨正则系综方法中粒子数分布与微正则系综方法中粒子数分布的差别.具体地,我们构造了一个可以利用数值方法精确求解微正则系综粒子数分布的特殊系统,通过将微正则系综粒子数分布与巨正则系综粒子数分布对比,可以直观的看到两者的误差.结果显示,基态粒子数分布误差要大于激发态,费米系统的误差要大于玻色系统的误差.该结果相对简单,能够在教学中作为直观的例子帮助学生理解巨正则系综方法的优势和缺点.

1 巨正则系综处理理想量子系统的优劣势

1.1 统计力学处理量子系统的困难

与力学不同,统计力学(平衡态统计)关注系统的宏观力学量,而不是系统所处的具体微观状态.系统的宏观物理量就是对所有可能的状态取平均值.基于各态历经假设——每一个微观状态出现的概率相同,得到宏观力学量的核心在于计算系统所有可能的微观状态的个数.以理想量子气体为例,能量和粒子数均固定的孤立系统对应微正则系综.总能量为 E,粒子数为 N 的情况下,系统微观状态数 Ω 的数学表达式为[4]

$$\Omega_{BE}(E,N)=\sum_{\{a_\varepsilon\}}\prod_{\varepsilon}\frac{(\omega_\varepsilon+a_\varepsilon-1)!}{a_\varepsilon!\ (\omega_\varepsilon-1)!} \tag{1}$$

收稿日期:2023-02-17;**修回日期**:2024-03-25

基金项目:国家自然科学基金(62106033)资助

作者简介:胡 健(1990—),男,云南大理人,大理大学工程学院讲师,主要从事大学物理教学和宇宙学研究工作.

通讯作者:陈玉柱,E-mail:chenyuzhu@ tiangong.edu.cn.

$$\Omega_{FD}(E,N)=\sum_{\{a_\varepsilon\}}\prod_\varepsilon \frac{\omega_\varepsilon!}{a_\varepsilon!\ (\omega_\varepsilon-a_\varepsilon)!} \quad (2)$$

其中 $\Omega_{BE}(E,N)$ 和 $\Omega_{FD}(E,N)$ 分别表示玻色气体和费米气体的微观状态数. a_ε 表示能量为 ε 的粒子数,ω_ε 是能级 ε 的简并度. 不同系统对于粒子数 a_ε 有不同的要求——对于玻色系统而言,同一个状态不对粒子数有限制,即 a_ε 可以取任意整数;对于费米系统,同一个状态上最多只能有一个粒子,即 a_ε 只能是 0 或者 1. 由于总粒子数和总能量固定,上述求和必须满足如下两个约束

$$E=\sum_\varepsilon a_\varepsilon \varepsilon \quad (3)$$

$$N=\sum_\varepsilon a_\varepsilon \quad (4)$$

理想量子气体状态数的求解实质是一个有约束的排列组合问题. 虽然理想量子系统的微观状态表达式可以写出来,但是精确求解却十分困难[1,2]. 文献[3]中指出,孤立系统微观状态数的求解需要用到数论中的限制拆分等数学知识和技巧.

1.2　巨正则系综与巨正则配分函数

巨正则系综对应能量和粒子数都可以与外界进行交换的开放系统. 在巨正则系综中,一个能量为 E,粒子数为 N 的状态出现的概率为

$$P(E,N)=\frac{1}{\Xi}e^{-\beta E-\alpha N} \quad (5)$$

其中 α 和 β 是引入的参数,Ξ 是巨配分函数. 对于理想量子气体,巨配分函数可以表示为

$$\Xi_{BE}(\beta,\alpha)=\prod_\varepsilon\left(\frac{1}{1-e^{-\beta\varepsilon-\alpha}}\right)^{\omega_\varepsilon} \quad (6)$$

$$\Xi_{FD}(\beta,\alpha)=\prod_\varepsilon\left(1+e^{-\beta\varepsilon-\alpha}\right)^{\omega_\varepsilon} \quad (7)$$

其中 $\Xi_{BE}(\beta,\alpha)$ 和 $\Xi_{FD}(\beta,\alpha)$ 分别表示理想玻色气体和理想费米气体的巨配分函数. 由于巨配分函数不存在任何约束,因此可以相对容易的计算出来. 统计力学的教科书上就有理想量子气体的巨配分函数[4,5],我们这里不再列出.

如果我们要求开放系统中平均能量等于孤立系统的能量,开放系统中平均粒子数等于孤立系统的粒子数

$$\langle E\rangle=E \quad (8)$$

$$\langle N\rangle=N \quad (9)$$

通过式(8)和(9)就可以反解出巨配分函数中参数 α 和 β,并给出孤立系统一个近似描述. 近似体现在关于宏观力学量的涨落上. 教科书[5]中指出,巨正则系综中的涨落是要大于正则系综,大于微正则系综的(微正则系综涨落为 0),但是在粒子数 $N\to\infty$ 时,以 $O(1/\sqrt{N})$ 的方式趋于 0.

巨正则系综的优点是系统不存在约束,从而导致巨配分函数容易求解. 巨正则系综的缺点是,在处理孤立系综时,宏观状态量存在涨落. 在使用巨正则系综处理孤立系统时,这种涨落对应着误差. 这种误差本质上是由于利用巨正则系综的状态概率分布概率近似微正则系综状态概率分布带来的. 这里状态概率分布可以等价为粒子数分布. 巨正则系综的粒子数为

$$\tilde{a}_\varepsilon=\frac{\omega_\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon+\alpha}\pm 1} \quad (10)$$

2　少体理想量子系统与其精确解

由于微正则系综的粒子数分布难以计算,在利用巨正则系综处理孤立系统时,粒子数分布的误差一直未能直观的表示出来. 为了直观的展示巨正则系综在处理孤立系统时粒子数分布与微正则系综粒子数分布的误差,本节我们考虑一个可精确求解系统. 它的单粒子能谱是某能量单位的整数倍,不考虑简并.

在系统总能量为 E,总粒子数为 N 的情况下,系统的一个微观状态就对应着一个粒子数分布$\{a_\varepsilon\}$,并满足式(4)和(5)中的两个约束条件. 例如,总能量为 6,粒子数为 3 的玻色系统,系统的微观状态数就是 3 个. 可以验证,对应的粒子数分别是$\{a_1=2, a_2=0, a_3=0, a_4=1, a_5=0,\cdots\}$,$\{a_1=0, a_2=3, a_3=0, a_4=0, a_5=0,\cdots\}$以及$\{a_1=1, a_2=1, a_3=1, a_4=0, a_5=0,\cdots\}$;对于费米系统,由于 a_ε 只能取 0 或者 1 的限制,系统的微观状态数就是 1 个,对应的粒子数只有$\{a_1=1, a_2=1, a_3=1, a_4=0, a_5=0,\cdots\}$. 对于该系统,在能量和粒子数确定的情况下,可以通过数值方法,得到粒子数分布$\{a_\varepsilon\}$的精确解. 精确解结果和巨正则系综的结果分别展示在图 1 和图 2 中.

3　巨正则系综结果与精确结果的比较

我们通过数值方法给出了该系统粒子数分布的精确解以及巨正则系综粒子数分布的近似解. 图 1 是 $E=60$,$N=3,4,5,6,7,8$ 等的情况. 可以看到巨正则系综得到的粒子数分布与精确解中的粒子数分布存在差异. 尤其在粒子数量较少时,这种误差尤为明显. 随着系统粒子数的增加,巨正则系综的结果与精确结果在高能级时误差越来越小. 不同能级误差也有不同,比如玻色系统,巨正则系综结果中基

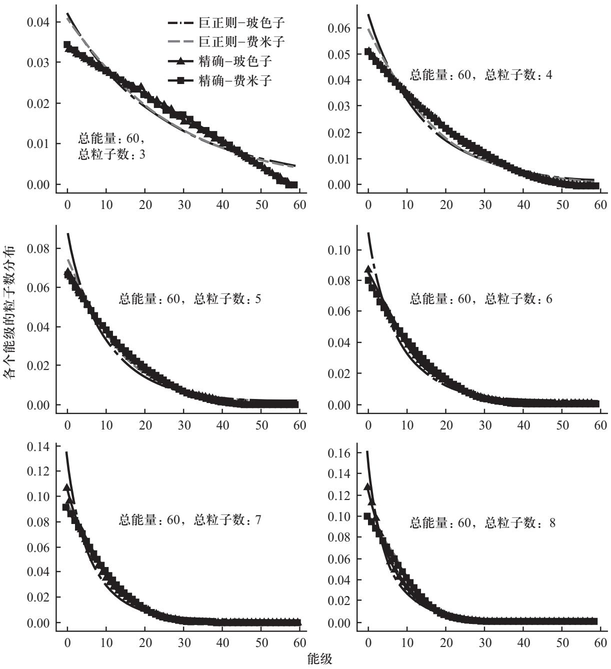

图 1　理想玻色气体和理想费米气体中，粒子数分布的精确解与巨正则系综中粒子数分布的近似解

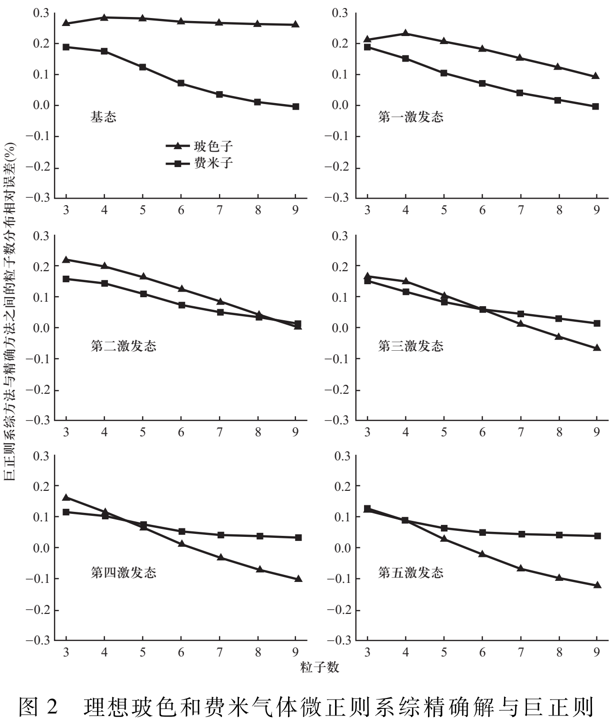

图 2　理想玻色和费米气体微正则系综精确解与巨正则系综近似解的基态粒子数与激发态粒子数分布偏差

态粒子数分布具有较大误差．基态粒子数决定着系统可能存在的 BEC 相变，因此我们推测，巨正则系综的结果对相变的计算也将存在相应的误差．

从图 1 中可以看到，巨正则系综的粒子数分布与微正则系综的结果差异会随着粒子数增多逐渐减小，这符合教科书[5]中涨落在粒子数 $N\to\infty$ 时，以 $O(1/\sqrt{N})$ 的方式趋于 0 的结论．然而，对于特殊的能级，尤其是低能级情况，误差正比于 $1/\sqrt{N}$ 的结果并不成立．为了更好的展示这种差异，在图 2 中给出粒子数分布精确解与巨正则系综近似解的相对误差 $(\tilde{a}_\varepsilon - a_\varepsilon)/a_\varepsilon$ 随粒子数的变化．可以看到，对于少体系统低能级的粒子数分布，并不会随着粒子数增大而逐渐减少，而是既可能增大也可能减小．误差随粒子数增大而逐渐减小的规律在少体系统的低能级粒子数分布中并不成立，这是教科书中没有的新结果．

4　总结与讨论

巨正则系综是统计力学的重要内容，巨正则系综可以精确的处理开放系统．巨正则系综也常被用作处理封闭系统的近似方法．在处理封闭系统时，相较于微正则系综，巨正则系综中宏观量存在涨落，对应着近似带来的误差．这个工作中，我们构造了一个可以利用数值方法精确求解的特殊系统，通过粒子数分布的精确解与巨正则系综得到近似解进行对比，可以直观的看到巨正则系综在处理孤立系统是粒子数分布与精确解之间的误差．结果指出，基态粒子数分布误差要大于激发态，玻色系统的误差要大于费米系统的误差．这一结果可帮助学生更好地理解巨正则系综在处理孤立系统时的优势与缺点．

参考文献：

[1]　Zhou Chi-chun; Dai Wu-sheng. Canonical partition functions: ideal quantum gases, interacting classical gases, and interacting quantum gases[J]. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2018(2): 023105.

[2]　Zhou Chi-chun; Chen Yu-zhu; Dai Wu-sheng. Unified framework for generalized statistics: canonical partition function, maximum occupation number, and permutation phase of wave function[J]. Journal of Statistical Physics, 2022, 186(1): 19-21.

[3]　Zhou Chi-chun; Dai Wu-sheng. A statistical mechanical approach to restricted integer partition functions[J]. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2018(5): 053111.

(下转 57 页)

The ubiquitous resistance in physics

JIN Feng-tao, GAO Cheng, WANG Xiao-wei, DAI Jia-yu

(Department of Physics, College of Science, National University of Defense Technology, Changsha, Hunan 410073, China)

Abstract: In the study of physics, the keyword resistance can be found in many laws and phenomena. The fundamental reason for the ubiquity of resistance is that everything is a contradictory unity composed of positive and negative aspects. The stable state of things is the result of the balance between spear and shield. When the balance is disrupted, the contradiction becomes apparent and the result is that the trend of resisting state changes. Energy, momentum or matter undergoes transfer during the process of resistance. Understanding this universal principle not only makes learning more efficient and enjoyable, but also allows one to appreciate the beauty and profound meaning of physics.

Key words: physics; resistance; contradiction; teaching

(上接 38 页)

[4] 汪志诚. 热力学统计物理(第四版)学习辅导书:热力学统计物理学习辅导书[M]. 北京:高等教育出版社, 2009.

[5] 顾莱纳. 热力学与统计力学[M]. 北京:北京大学出版社, 2001.

Demonstration of discrepancies of grand-canonical ensemble methods for finite isolate quantum systems

HU Jian[1], ZHOU Chi-chun[1], GU Yun[2], CHEN Yu-zhu[3]

(1. School of Engineering, Dali University, Dali, Yunnan 871003, China;

2. Department of Physics, Tianjin University, Tianjin 300072, China;

3. Department of Physics, Tianjin Polytechnic University, Tianjin 300387, China)

Abstract: The grand canonical ensemble method is an important one in quantum statistical mechanics. The grand canonical method is generally used to deal with open systems. The grand canonical method is also used to deal with isolated systems as an approximation method. It is easier for the grand canonical method than the micro canonical ensemble method in dealing with identical particles. In exchange, there are discrepancies in the results of the grand canonical ensemble method when dealing with isolated systems. The discrepancy of macroscopic quantities is provided when the particle number goes to infinity. The discrepancy comes from the different between the particle distribution of the grand canonical ensemble and of the micro canonical ensemble. In this paper, we construct an isolated system which can be exactly solved with the micro canonical ensemble method. By comparing the particle distribution in the grand canonical ensemble method and in the micro canonical ensemble method, we show the discrepancy directly. The result shows that the discrepancy is larger when we have less particle number in the system. The discrepancy of ground states is larger than excited states. The discrepancy of Bose systems is larger than Fermi systems.

Key words: ensemble theory; particle distribution; quantum statistics