Замечание. Интеграл (8) можно вычислить следующим образом:

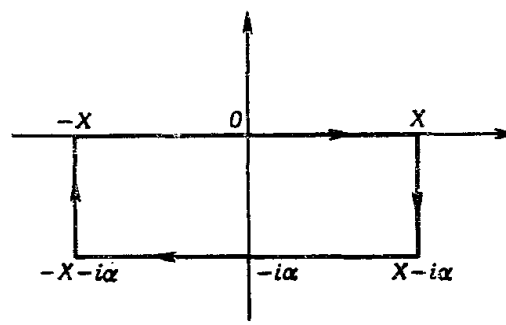
$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2}ax^2+ixy\right]dx=$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2}a\left(x-\frac{iy}{a}\right)^2-\frac{y^2}{2a}\right]dx=\sqrt{\frac{2\pi}{a}}\,e^{-y^2/2a}. \qquad (10)$$

Соотношение

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2/2}\,dx=\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a(x-i\alpha)^2/2}\,dx=\sqrt{\frac{2\pi}{a}} \qquad (11)$$

можно доказать, если проинтегрировать $e^{-az^2/2}$ по замкнутому контуру, изображенному на фиг. 40 (интеграл по всему контуру



Фиг. 40

равен нулю), и затем устремить $X \to \infty$. Часть интеграла в пределах от $-X-i\alpha$ до $-X$ и от $X-i\alpha$ до X обращается в нуль.

ЗАДАЧИ

[А]

1. Показать, что флуктуация энергии в каноническом распределении определяется формулой

$$\overline{(E-\overline{E})^2}=kT^2C_V,$$

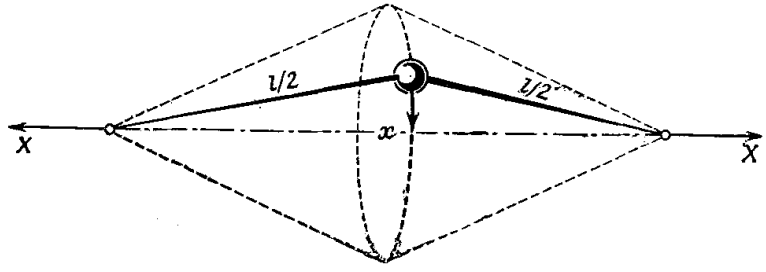
где T — абсолютная температура и C_V — теплоемкость при постоянном объеме. Тем же способом доказать следующее соотношение:

$$\overline{(E-\overline{E})^3}=k^2\left\{T^4\left(\frac{\partial C_V}{\partial T}\right)_V+2T^3C_V\right\}.$$

Показать, в частности, что для идеального газа, состоящего из N одноатомных молекул (без учета их внутренней структуры), эти соотношения можно свести к следующим:

$$\frac{\overline{(E-\overline{E})^2}}{\overline{E}^2}=\frac{2}{3N}, \qquad \frac{\overline{(E-\overline{E})^3}}{\overline{E}^3}=\frac{8}{9N^2}.$$

2. Груз, имеющий массу m, закреплен в средней точке нити длиной l (фиг. 41) и вращается вокруг оси, соединяющей концы



Фиг. 41

нити. Система находится в контакте с окружающим пространством при температуре T. Вычислить натяжение X, действующее между концами нити в зависимости от расстояния x между ними.

3. Идеальный газ, состоящий из N частиц массой m (подчиняющийся классической статистике), заключен в бесконечно высокий цилиндр, помещенный в однородное гравитационное поле, и находится в состоянии теплового равновесия. Вычислить классическую статистическую сумму, свободную энергию Гельмгольца, среднюю энергию и теплоемкость системы (см. также гл. 1, задача 15).

4. Цилиндр радиусом R и длиной L вращается вокруг оси с постоянной угловой скоростью ω. Найти распределение плотности идеального газа в цилиндре. Пренебречь действием гравитационного поля. Вычисления провести в классическом случае, предполагая, что система находится в тепловом равновесии при температуре T. (*Указание*. Гамильтониан, описывающий движение во вращающейся системе координат, равен $H^* = H - \omega L$, где H — гамильтониан в покоящейся системе координат и L — момент количества движения системы. Использовать каноническое распределение для H^*.)

5. В теории относительности компоненты импульса и энергия точечной массы m связаны соотношениями:

$$p_i=\frac{mv_i}{\sqrt{1-(v/c)^2}} \qquad (i=x,\ y,\ z)$$

и

$$\varepsilon = \frac{mc^2}{\sqrt{1-(v/c)^2}},$$

где c — скорость света, $v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$ — скорость и v_x, v_y и v_z — компоненты скорости точечной массы. Показать, что распределение Максвелла — Больцмана приводит к соотношению

$$\overline{\left(\frac{\frac{1}{2}mv_i^2}{\sqrt{1-(v/c)^2}}\right)} = \frac{1}{2}kT.$$

(*Указание*. Выразить ε через импульсы и использовать результаты примера 1.)

6. Обозначим обобщенные координаты, описывающие состояние системы с $3N$ степенями свободы, через $q_1, q_2, \ldots, q_{3N}$. Пусть X_j — сила, соответствующая координате q_j. (Если гамильтониан системы H, то $X_j = -\partial H/\partial q_j$.) Показать, что

$$\overline{\sum_{j=1}^{3N} q_j X_j} = -3NkT,$$

где T — абсолютная температура. Это — теорема вириала.

В частности, если газ, состоящий из N молекул, потенциал взаимодействия которых равен $U(q_1, q_2, \ldots, q_{3N})$, помещен в сосуд объемом V, то теорема вириала принимает следующий вид:

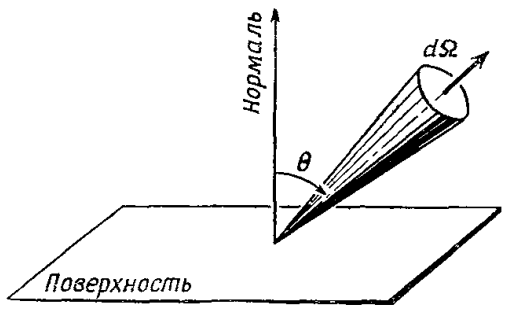
$$pV = NkT - \frac{1}{3}\overline{\sum_{j=1}^{3N} q_j \frac{\partial U}{\partial q_j}},$$

где p — давление, которое оказывают молекулы газа на стенки сосуда. Здесь $q_1, q_2, \ldots, q_{3N}$ — декартовы координаты, определяющие положение этих N молекул.

7. В сосуде объемом V, находящемся в контакте с термостатом при температуре T, создан вакуум. Показать, что давление на стенки сосуда, обусловленное тепловым излучением внутри него, равно $^1/_3$ от плотности энергии u теплового излучения.

8. Какое количество энергии (в ваттах) необходимо сообщить черному телу в виде куба объемом 1 *см*^{3}, помещенному в откачанный сосуд, чтобы поддерживать его температуру постоянной и равной соответственно 500, 800 и 1000° К? Предполагается, что стенки сосуда являются черным телом и имеют температуру 300° К.

Замечание. Черное тело (абсолютно черное тело) поглощает все падающее на него излучение. Энергия, излучаемая с единицы площади его поверхности в единицу времени в телесный угол $d\Omega$ под углом θ к нормали к поверхности (фиг. 42), равна



Фиг. 42

$$J(\omega, T, \theta)\, d\omega\, d\Omega = c u(\omega, T)\, d\omega \cos\theta \frac{d\Omega}{4\pi};$$

здесь c — скорость света, T — абсолютная температура черного тела и $u(\omega, T)$ — плотность энергии, определенная в решении примера 4.

9. Предположим, что магнитный момент может принимать любое из дискретных значений $g\mu_B m$, определяющих его проекцию на направление магнитного поля H (магнитное квантовое число m может быть равно J, $J-1$, $J-2$, ..., $-J+1$, $-J$). Вычислить намагниченность M системы, состоящей из n таких магнитных моментов в единице объема. Вычислить магнитную восприимчивость χ в слабом поле при высоких температурах ($g\mu_B JH \ll kT$). Исследовать случаи $J = 1/2$ и $J \to \infty$ ($\mu_B \to 0$ и $g\mu_B J \to \mu_0$). Предполагать, что взаимодействие между магнитными моментами пренебрежимо мало.

10. На поверхности, имеющей N_0 адсорбирующих центров, адсорбировано N ($N \leqslant N_0$) молекул газа. Показать, что химический потенциал μ молекул равен

$$\mu = kT\left[\ln\frac{N}{N_0 - N} - \ln a(T)\right],$$

где $a(T)$ — статистическая сумма одной адсорбированной молекулы (пренебречь взаимодействием между адсорбированными молекулами).

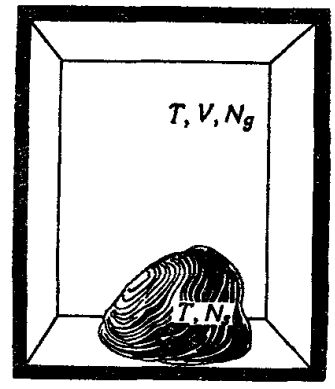
11. Твердое тело и пар, состоящие из атомов одного и того же сорта, находятся в равновесии в замкнутом сосуде объемом V при температуре $T°$ К (фиг. 43). Предположим, что статистическая сумма для твердого тела, состоящего из N_s атомов, имеет вид $Z_s(T, N_s) = z_s(T)^{N_s}$, и пар является идеальным газом, состоящим из N_g молекул. Показать, что условия равновесия

при $N_s \gg 1$ и $N_g \gg 1$ приближенно имеют вид

$$N_g = \frac{z_g(T, V)}{z_s(T)}.$$

Здесь $z_g(T, V)$ — статистическая сумма одной молекулы газа, который для простоты предполагается одноатомным. Предполагать, что объем, занимаемый твердым телом, пренебрежимо мал по сравнению с V.

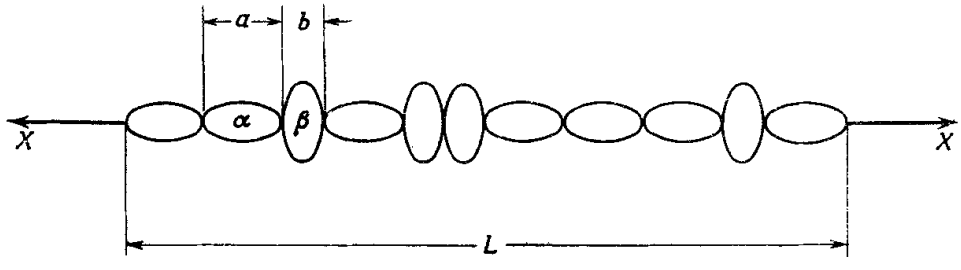
Построить график зависимости свободной энергии Гельмгольца от N_s. Обсудить условия, при которых устанавливается равновесие.



Фиг. 43

12. Рассмотреть равновесие между твердым телом и паром, состоящим из одноатомных молекул. Предполагается, что для того, чтобы перевести твердое тело в совокупность отдельных атомов, необходимо затратить энергию φ на один атом. Для простоты колебания атомов в твердом теле рассматривать на основе модели Эйнштейна, т. е. предполагать, что каждый атом представляет собой трехмерный гармонический осциллятор, совершающий колебания с частотой ω около положения равновесия независимо от других атомов. Вычислить давление пара как функцию температуры.

13. Молекула в виде цепочки образована N одномерными элементами, расположенными вдоль прямой линии. Предполагается,



Фиг. 44

что каждый одномерный элемент может находиться либо в состоянии α, либо в состоянии β (фиг. 44). В первом случае он имеет длину a и энергию E_α, во втором случае соответствующие величины равны b и E_β. Найти связь между длиной всей молекулы L

и натяжением X, действующим между обоими концами молекулы. Воспользоваться каноническим ансамблем при постоянном натяжении.

14. Показать, что статистическая сумма $Z(N, V, T)$ канонического ансамбля удовлетворяет следующему уравнению:

$$N\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial N}\right)_{V,T}+V\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V}\right)_{N,T}=\ln Z.$$

Для простоты предполагается, что система однокомпонентна и состоит из N частиц и что внешним параметром является только объем V.

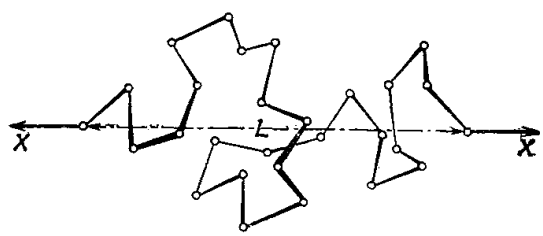
15. Большие статистические суммы фаз I и II соответственно равны $\Xi_{\mathrm{I}}(\lambda_A, \lambda_B, \ldots, T, V_{\mathrm{I}})$ и $\Xi_{\mathrm{II}}(\lambda_A, \lambda_B, \ldots, T, V_{\mathrm{II}})$. Фазы находятся в равновесии друг с другом, причем между ними возможен обмен частицами A, B, ... Показать, что число частиц N'_A, N''_A, N'_B, N''_B, ... в фазах I и II определяется соотношением

$$\frac{N'_A}{N''_A}=\frac{\partial \ln \Xi_{\mathrm{I}}/\partial\lambda_A}{\partial \ln \Xi_{\mathrm{II}}/\partial\lambda_A} \qquad (N'_A+N''_A=N_A),$$

где N_A — полное число частиц типа A и т. д.

[Б]

16. Оценить величину теплоемкости для одномерного ангармонического осциллятора, потенциальная энергия которого равна $V(q) = cq^2 - gq^3 - fq^4$. Обсудить зависимость среднего значения координаты q осциллятора от температуры T. Здесь c, g и f — положительные постоянные. Обычно $g \ll c^{3/2}/\sqrt{(kT)}$ и $f \ll c^2/kT$.



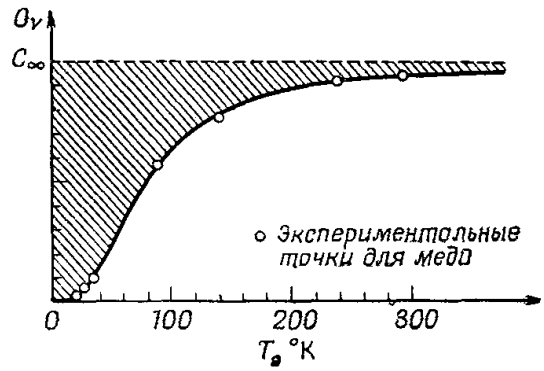
Фиг. 45

17. Молекула в форме цепочки состоит из N элементов, каждый из которых имеет длину a (фиг. 45). Элементы соединены таким образом, что могут свободно вращаться в сочленениях. Найти соотношение между натяжением X, действующим между обоими концами этой трехмерной молекулы, и расстоянием L

между ними. (Предполагать, что колебательная и другие виды энергии не зависят от формы молекулы.)

18. Вывести формулу Планка для теплового излучения в диспергирующей среде, в которой показатель преломления n зависит от частоты излучения ν.

19. Колебательные движения в твердом теле описываются следующей дисперсионной формулой: $\omega = Aq^n$. Они дают вклад в удельную теплоемкость, так как при высокой температуре играют роль тепловых возбуждений. Показать, что при низкой температуре удельная теплоемкость пропорциональна $T^{3/n}$. (*Указание.* Следовать выводу формулы для теплового излучения или для удельной теплоемкости в дебаевской модели твердого тела.)



Фиг. 46

20. На фиг. 46 представлена зависимость теплоемкости C_V твердого тела при постоянном объеме от температуры; через C_∞ обозначена теплоемкость при высокой температуре, равная ее классическому значению (закон Дюлонга и Пти). Показать, что величина заштрихованной площади над кривой теплоемкости соответствует энергии нулевых колебаний.

21. Определить теплоемкость одномерного и двумерного кристаллов, применяя способ, использованный для трехмерной модели Дебая (см. пример 3).

22. Обозначим через $\Phi(V)$ потенциальную энергию межатомных связей твердого тела, имеющего объем V, для случая, когда все атомы покоятся в соответствующих положениях равновесия. Нормальные частоты колебаний атомов вблизи их положений равновесия обозначим через $\nu_j(V)$ ($j = 1, 2, \ldots, 3N - 6$, где N — число атомов, образующих твердое тело). Предполагается, что изменение нормальных частот, связанное с изменением

объема V, может быть записано в виде

$$\frac{\partial \ln \nu_j}{\partial \ln V} = -\gamma \qquad (j=1, 2, \ldots, 3N-6)$$

для всех нормальных частот с общей постоянной γ ($\gamma > 0$) (предположение Грюнайзена). Показать, что давление в твердом теле равно

$$p = -\frac{d\Phi}{dV} + \gamma \frac{U}{V}.$$

Объяснить физический смысл первого и второго членов. (Это уравнение состояния известно как уравнение Ми — Грюнайзена.) Через U обозначена часть внутренней энергии, связанная с колебаниями атомов.

Предположить, что

$$\Phi(V) = \frac{(V-V_0)^2}{2\varkappa_0 V_0}$$

($\varkappa_0$ и V_0 — постоянные). Обычно γ имеет величину порядка 1 — 3 и $\varkappa_0 C_V T/V_0 \ll 1$. ($C_V$ — теплоемкость при постоянном объеме, T — абсолютная температура.) Учитывая эти соотношения, рассмотреть тепловое расширение твердых тел при постоянном давлении $p = 0$.

23. Пользуясь выражением для статистической суммы классического идеального газа, вычислить плотность состояний $\Omega(E)$ с помощью преобразования (2.6). Для простоты предполагать, что газ состоит из молекул одного типа. Пренебречь внутренними степенями свободы.

24. Вычислить плотность состояний $\Omega(E)$ системы N ($N \gg 1$) классических гармонических осцилляторов с частотой ω с помощью преобразования (2.6). Определить ее асимптотическое значение, пользуясь методом перевала. Вывести отсюда формулу Стирлинга.

25. Два жестких диполя находятся в состоянии теплового равновесия; расстояние между их центрами равно R. Вычислить среднюю силу, действующую между диполями. Рассмотреть эту систему при высоких температурах.

[B]

26. Система A находится в контакте с источником тепла R. Всякий раз, когда система A получает энергию E от источника R, с помощью подходящего устройства W (источник работы) энергия

nE (n — положительная или отрицательная постоянная) передается от W к R. Показать, что каноническое распределение для системы, имеющей такой специальный источник тепла, записывается в виде

$$\rho(E) \sim \exp\{-\beta(1-n)E\}.$$

27. Доказать, что магнитная восприимчивость системы, подчиняющейся классической механике и классической статистике, строго равна нулю (теорема Бора — Ван Левен) [1]). [*Указание.* Пусть $\boldsymbol{A}$ — вектор-потенциал, определяющий магнитное поле. Тогда гамильтониан системы заряженных частиц в магнитном поле может быть записан в виде

$$\mathscr{H} = \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2m_j}\left\{\boldsymbol{p}_j + \frac{e_j}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_j)\right\}^2 + U(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N).]$$

28. Потенциал взаимодействия N частиц, расположенных на прямой, выражается в виде функции только от взаимного расстояния между частицами. Считать систему классической. Доказать, что в том случае, когда учитывается взаимодействие только между соседними частицами, связь между давлением и объемом (расстояние L между крайними частицами) может быть описано простой однозначной функцией, и поэтому не будет происходить никаких особых явлений, соответствующих фазовому переходу. Порядок расположения частиц вдоль прямой линии предполагается неизменным.

29. Гамильтониан электрона в магнитном поле $\boldsymbol{H}$ равен $\mathscr{H} = -\mu_B\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{H}$, где $\boldsymbol{\sigma}$ — спиновый оператор Паули и μ_B — магнетон Бора. Найти: 1) матрицу плотности в представлении, диагонализующем оператор σ_z; 2) матрицу плотности в представлении, диагонализующем оператор σ_x, и 3) среднее значение σ_z в этих представлениях. Ось z направлена вдоль поля.

30. Определить матричные элементы матрицы плотности $\rho = \exp(-\beta\mathscr{H})$, $\mathscr{H} = p^2/2m + m\omega^2q^2/2$ одномерного гармонического осциллятора в q-представлении. Обсудить, в частности, предельный случай $\hbar\omega/kT = \beta\hbar\omega \ll 1$. [*Указание.* Собственные функции $\psi_n(q)$, соответствующие собственным значениям энергии

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega,$$

[1]) См. книгу Ван Флека [14] и статью Терлецкого [15].— *Прим. ред.*

имеют вид

$$\psi_n(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{H_n(\xi)}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\xi^2/2} \qquad \left(\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, q\right),$$

где $H_n(\xi)$ — полиномы Эрмита, определяемые формулой

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2} = \frac{e^{\xi^2}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (-2iu)^n e^{-u^2+2i\xi u}\, du.$$

Воспользоваться последней (интегральной) формой этих полиномов.]

31. Вычислить $\overline{q^2}$ и $\overline{p^2}$, пользуясь матрицей плотности в q-представлении, полученной в предыдущей задаче для одномерного гармонического осциллятора.

32. Показать, что в q-представлении (ненормированная) матрица плотности $\exp(-\beta\mathscr{H})$ для гамильтониана $\mathscr{H}(p, q)$ имеет вид

$$\langle q' | e^{-\beta\mathscr{H}} | q'' \rangle = \exp\left[-\beta\mathscr{H}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'} \quad q'\right)\right] \delta(q' - q'').$$

Здесь

$$\mathscr{H}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}, q'\right)$$

— q-представление гамильтониана $\mathscr{H}$ и $\delta(q' - q'')$ — дельта-функция Дирака.

Применить формулу к свободной частице с $\mathscr{H} = p^2/2m$ и найти матрицу плотности в q-представлении.

33. Гамильтониан системы, состоящей из N частиц, равен

$$\mathscr{H} = \sum \frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N).$$

Предполагается, что частицы различимы. Найти $\boldsymbol{r}$-представление $\langle \boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N | \exp(-\beta\mathscr{H}) | \boldsymbol{r}_1'', \ldots, \boldsymbol{r}_N'' \rangle$ матрицы плотности $\exp(-\beta\mathscr{H})$ этой системы. Показать, что в пределе $h \to 0$ статистическая сумма $\mathrm{Sp}(\exp(-\beta\mathscr{H}))$ совпадает с классическим значением

$$Z_{\text{кл}} = \frac{1}{h^{3N}} \int \ldots \int \exp[-\beta\mathscr{H}(\boldsymbol{p}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_1, \ldots)]\, d\boldsymbol{p}_1 \ldots d\boldsymbol{r}_1 \ldots.$$

(*Указание.* Воспользоваться результатами задачи 32.)