（装订线内不要答题）

中国科学技术大学物理学院
2017～2018 学年第 2 学期中考试卷

课程名称：热力学与统计物理　　　　课程代码：________

开课院系：物理学院　　　　考试形式：闭卷

姓名：________　学号：________　专业：________

题 号	一	二	三	四	五	总 分
得 分						

【答题中可能用到的数学关系：

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}dx = \sqrt{\pi/a}\ ; \qquad \int_0^{\infty} x^2 e^{-x^2}dx = \sqrt{\pi}/4\ ;$$

$$\int_0^{\infty} \frac{x^{p-1}}{e^x-1}dx = \Gamma(p)\zeta(p); \quad \int_0^{\infty} \frac{x^{p-1}}{e^x+1}dx = \left(1-\frac{1}{2^{p-1}}\right)\Gamma(p)\zeta(p),$$

其中 $\Gamma(p)$ 是欧拉 Γ 函数。$\Gamma(p+1) = p\Gamma(p)$；当 p 是整数时 $\Gamma(p+1) = p!$；$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$。$\zeta(p) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-p}$ 是黎曼 ζ 函数。$\zeta(3/2) \simeq 2.612$，$\zeta(2) = \pi^2/6$, $\zeta(5/2) \simeq 1.3415$，$\zeta(3) \simeq 1.202$，$\zeta(4) = \pi^4/90$。】

一、 某一系统由 N 个无相互作用的粒子组成，每个粒子可以可处的能级是$\varepsilon_l = l\varepsilon$。其中 $\varepsilon > 0$ 是常数， $l = 0, 1, 2, \cdots$ 为角动量量子数。第 l 个能级的简并度为 $2l+1$。

1. 求单粒子配分函数。
2. 求内能 U，并写出低温和高温极限。
3. 求低温和高温极限下的熵。

1. 解法一：

$$
\begin{aligned}
z &= \sum_{l=0}^{\infty} \omega_l e^{-\beta\varepsilon_l} = \sum_l (2l+1)e^{-l\beta\varepsilon} = 2\sum_l l e^{-l\beta\varepsilon} + \sum_l e^{-l\beta\varepsilon} \\
&= \Big[2x\partial_x(\sum_l x^l) + \sum_l x^l\Big]_{x=e^{-\beta\varepsilon}} = \Big[\frac{2x}{(1-x)^2} + \frac{1}{1-x}\Big]_{x=e^{-\beta\varepsilon}} \\
&= \frac{1+e^{-\beta\varepsilon}}{(1-e^{-\beta\varepsilon})^2}
\end{aligned}
$$

解法二：

$$
\begin{aligned}
z &= \sum_{l=0}^{\infty} \omega_l e^{-\beta\varepsilon_l} = \sum_l (2l+1)e^{-l\beta\varepsilon} \\
&\simeq \begin{cases} 1+3e^{-\beta\varepsilon} & \text{低温极限} \\ \\ \int_0^\infty (2x+1)e^{-x\beta\varepsilon}dx = \frac{2}{(\beta\varepsilon)^2} + \frac{1}{\beta\varepsilon} & \text{高温极限} \end{cases}
\end{aligned}
$$

2.

$$
U = -N\frac{\partial \ln z}{\partial \beta} = N\varepsilon \frac{e^{-\beta\varepsilon}(3+e^{-\beta\varepsilon})}{1-e^{-2\beta\varepsilon}}
$$

低温极限 $e^{-\beta\varepsilon} \ll 1$

$$
U = 3N\varepsilon e^{-\beta\varepsilon}
$$

高温极限 $\beta\varepsilon \ll 1 \to e^{-\beta\varepsilon} \simeq 1-\beta\varepsilon$

$$
U = 2Nk_BT
$$

解法二：

$$
\ln z \simeq \begin{cases} 3e^{-\beta\varepsilon} & \text{低温极限} \\ \ln 2 - 2\ln(\beta\varepsilon) \end{cases}
$$

$$
U = -N\frac{\partial \ln z}{\partial \beta} \simeq \begin{cases} 3N\varepsilon e^{-\beta\varepsilon} & \text{低温极限} \\ 2Nk_BT & \text{高温极限} \end{cases}
$$

3.

$$
S = k_B[N\beta \ln z + \beta U] = \cdots
$$

（装订线内不要答题）

二、 位于 $\mathbf{r}=(x,y,z)$ 处、动量为 $\mathbf{p}=(p_x,p_y,p_z)$ 的带电粒子在磁场中的能量为

$$\varepsilon=\frac{(p_x-By/2)^2+(p_y+eBx/2)^2+p_z^2}{2m}-\mu B,$$

其中 m、e 和 B 分别是粒子质量、电荷和磁场强度。μ 是粒子的磁矩，可能取值为 $\pm\mu_0$。体积为 V 的容器里有 N 个这样的粒子，粒子之间的相互作用可以忽略，系统的温度为 T。

1. 求温度为 T 时的自由能。
2. 求体系的压强。
3. 求该体系的能量涨落。

1.

$$\begin{aligned}
z &= \sum_\mu \int e^{-\beta\varepsilon}\frac{d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{p}}{h^3}\\
&= \sum_\mu \int e^{-\beta[(p_x-eBy/2)^2+(p_y+eBx/2)^2+p_z^2]/(2m)+\beta\mu B}\frac{d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{p}}{h^3}\\
&= \frac{e^{\beta\mu_0 B}+e^{-\beta\mu_0 B}}{h^3}\int d^3\mathbf{r}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\beta(p_x-eBy/2)^2/2m}dp_x\\
&\times\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\beta(p_y+eBx/2)^2/2m}dp_y\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\beta p_z^2/2m}dp_z\\
&= 2V\left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{3/2}\cosh(\beta\mu_0 B)
\end{aligned}$$

三、 极端相对论电子的能谱近似为 $\varepsilon(\mathbf{p}) = c|\mathbf{p}|$，其中 c 为光速，$\mathbf{p}$ 是电子动量。电子密度为 n，不考虑电子之间的相互作用。

1. 求费米能 ε_F。
2. 求低温（$k_BT \ll \varepsilon_F$）时化学势和温度的关系，准确到温度的平方项。
3. 求系统的等容热容。

1. 单位体积里的态密度

$$\begin{aligned}
\Omega(\varepsilon) &= 2\int \delta(\varepsilon - cp)\frac{d^3xd^3p}{h^3} = \frac{8\pi V}{h^3}\int \delta(\varepsilon - cp)p^2dp = \frac{8\pi\varepsilon^2}{h^3c^3} \\
&= \frac{\varepsilon^2}{\pi^2\hbar^3c^3} \\
n &= \int_0^{\varepsilon_F}\Omega(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{\varepsilon_F^3}{3\pi^2\hbar^3c^3} \\
\varepsilon_F &= c\hbar(3\pi^2n)^{1/3}
\end{aligned}$$

2. Sommerfeld 展开

$$\begin{aligned}
I &= \int g(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon = \int_0^{\mu} g(\varepsilon)d\varepsilon - \int_0^{\mu} g(\varepsilon)[1-f(\varepsilon)]d\varepsilon + \int_{\mu}^{\infty} g(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon \\
&\simeq \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon)d\varepsilon + \int_{\varepsilon_F}^{\mu} g(\varepsilon)d\varepsilon + \int_0^{\infty}\frac{g(\mu+\Delta)-g(\mu-\Delta)}{e^{\Delta/k_BT}+1}d\varepsilon \\
&\simeq \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon)d\varepsilon + g(\varepsilon_F)(\mu-\varepsilon_F) + 2g'(\varepsilon_F)(k_BT)^2\int_0^{\infty}\frac{x}{e^x+1}dx \\
&= \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon)d\varepsilon + g(\varepsilon_F)(\mu-\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{6}g'(\varepsilon_F)(k_BT)^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
n &= \int \Omega(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon \\
&\simeq \int_0^{\varepsilon_F}\Omega d\varepsilon + \Omega(\varepsilon_F)(\mu-\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{6}\Omega'(\varepsilon_F)(k_BT)^2 \\
&= n + \Omega(\varepsilon_F)(\mu-\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{6}\Omega'(\varepsilon_F)(k_BT)^2 \\
\mu &\simeq \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{6}\frac{\Omega_F'}{\Omega_F}(k_BT)^2 = \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{3}\frac{(k_BT)^2}{\varepsilon_F}
\end{aligned}$$

3.

$$\begin{aligned}
U = \bar{E} &= \int \varepsilon\Omega f d\varepsilon \\
&\simeq \int_0^{\varepsilon_F}\varepsilon\Omega d\varepsilon + \varepsilon_F\Omega(\varepsilon_F)(\mu-\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{6}(\varepsilon\Omega)'|_{\varepsilon_F}(k_BT)^2 \\
&= \frac{\varepsilon_F^4}{4\pi^2\hbar^3c^3} + \frac{\pi^2}{6}\Omega(\varepsilon_F)(k_BT)^2 \\
C_v &= \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\pi^2}{3}\Omega(\varepsilon_F)k_B^2T
\end{aligned}$$

（装订线内不要答题）

四、 处于旋转约束势阱中的二维玻色子的有效能量为

$$\varepsilon(\mathbf{r},\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/(2m) + V(|\mathbf{r}|),$$

$V(r)$ 是粒子感受到的有效约束势，

$$V(r) = \frac{1}{2}m(\omega^2 - \Omega^2)r^2 + \frac{kr^4}{4}。$$

其中 $\mathbf{p}$、$\mathbf{r}$ 和 m 分别是原子动量、位置和质量，$k > 0$ 是一个小的常数。旋转频率 Ω 大于势阱的约束频率 ω。在这种情况下原子主要集中在一个环上而不是势阱中心。粒子之间的相互作用很弱，可以忽略不计。

1. 求系统的单粒子态密度。
2. 求发生玻色-爱因斯坦凝聚时体系的化学势。
3. 实验上能达到的最低温度为 T，求可以发生玻色—爱因斯坦凝聚时系统最少有多少个粒子？假设 $k_BT \ll m^2(\Omega^2 - \omega^2)^2/k$。

1. 发生凝聚时，化学势为能量的最低点，即动能为零、势能最小。

$$\begin{aligned}
0 &= \partial_r V = m(\omega^2 - \Omega^2)r + kr^3 \\
r_m^2 &= \frac{m(\Omega^2 - \omega^2)}{k} \\
\mu &= E_m = V_m = V(r_m) \\
&= \frac{1}{2}m(\omega^2 - \Omega^2)\frac{m(\Omega^2 - \omega^2)}{k} + \frac{k}{4}\Big(\frac{m(\Omega^2 - \omega^2)}{k}\Big)^2 \\
&= -\frac{m^2(\Omega^2 - \omega^2)^2}{4k} \\
V(r) &= V_m + \frac{k}{4}(r^2 - r_m^2)^2
\end{aligned}$$

2.

$$\begin{aligned}
g(\varepsilon) &= \int \delta[\varepsilon - V_m - p^2/2m - k(r^2 - r_m^2)^2/4]\frac{d^2rd^2p}{h^2} \\
&= \frac{m(2\pi)^2}{2h^2}\int \Theta[\varepsilon - V_m - k(r^2 - r_m^2)^2/4]dr^2
\end{aligned}$$

积分区间为$r^2 > 0 \&\& -2\sqrt{(\varepsilon - V_m)/k} \le r^2 - r_m^2 \le 2\sqrt{(\varepsilon - V_m)/k}$，即$\max(r_m^2 - 2\sqrt{(\varepsilon - V_m)/k}, 0) \le r^2 \le r_m^2 + 2\sqrt{(\varepsilon - V_m)/k}$

$$g(\varepsilon) = \frac{m}{2\hbar^2}\begin{cases} 4\sqrt{(\varepsilon - V_m)/k} & \text{if } \ \varepsilon - V_m < |V_m| \\ r_m^2 + 2\sqrt{(\varepsilon - V_m)/k} & \text{if } \ \varepsilon - V_m > |V_m| \end{cases}$$

3. 发生 BEC 时，体系处于激发态上的粒子数为

$$
\begin{aligned}
N_{ex} &= \int g(\varepsilon)\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}d\varepsilon \\
&= \int_{V_m}^{0}\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\sqrt{(\varepsilon-V_m)/k}}{e^{\beta(\varepsilon-V_m)}-1}d\varepsilon+\int_0^{\infty}\frac{m}{4\hbar^2}\frac{r_m^2+2\sqrt{(\varepsilon-V_m)/k}}{e^{\beta(\varepsilon-V_m)}-1}d\varepsilon \\
&= \frac{2m(k_BT)^{3/2}}{\hbar^2\sqrt{k}}\int_0^{\frac{|V_m|}{k_BT}}\frac{\sqrt{x}}{e^x-1}dx+\frac{2m(k_BT)^{3/2}}{\hbar^2\sqrt{k}}\int_{\frac{|V_m|}{k_BT}}^{\infty}\frac{\cdots}{e^x-1}dx \\
&\simeq \frac{2m(k_BT)^{3/2}}{\hbar^2\sqrt{k}}\int_0^{\infty}\frac{\sqrt{x}}{e^x-1}dx=\frac{2m(k_BT)^{3/2}}{\hbar^2\sqrt{k}}\Gamma(3/2)\zeta(3/2)
\end{aligned}
$$

要实现 BEC 的话要求 $N > N_{ex}$。

（装订线内不要答题）

五、 考虑如下“一维冰”问题：在一个圆上等间隔地摆放 N 个氧原子。这些氧原子把圆分割成 N 个区间，每个区间里有两个氢原子。一个区间里的两个氢原子可以和该区间两端的任一氧原子结合。它们可以和同一个氧原子结合，这样形成的一个“水分子”能量为 ε_1。它们也可以和不同的氧原子结合，这样形成的一个“水分子”能量为 $\varepsilon_2(>\varepsilon_1)$。每个氧原子必须且只能和两个氢原子结合；氢原子之间可以分辨，并且它们只会和所在区间两端的氧原子结合，不会和其它氧原子结合。

1. 不考虑其它相互作用，请写出系统可能的能量以及简并度。
2. 求温度为 T 时系统的正则配分函数。
3. 在热力学极限下，即 $N\to\infty$，求每个“水分子”的平均能量和温度的关系。
4. 改变温度时，这个体系能否会发生相变？如果会的话，请定出相变温度和潜热。

1. 考虑第 1 和第 2 两个氧原子之间的两个氢原子，如果它们都和第 1 个氧原子结合的话，那么第 2 个氧原子只能和2、3 两个氧原子之间的两个氢原子结合，其它依次类推。此时系统的能量为 $N\varepsilon_1$。同理如果第 1 和第 2 两个氧原子之间的两个氢原子都和第 2 个氧原子结合的话，系统能量也为 $N\varepsilon_1$。

   如果 1、2 两氧原子之间的两个氢原子分别和 1、2 两氧原子结合的话，其他区间的两个氢原子也只能类似的结合。此时系统的能量为 $N\varepsilon_2$。两个氢原子和两个氧原子的结合方式有两种，因此此时系统的简并度为 2^N。

   因此系统可能能量为 $N\varepsilon_1$，简并度为 2；或者 $N\varepsilon_2$，简并度为 2^N。

2.

$$Z_c=\sum_s e^{-\beta E_s}=\sum_E \Omega(E)e^{-\beta E}=2e^{-N\beta\varepsilon_1}+2^N e^{-N\beta\varepsilon_2}$$

$$\begin{array}{c} N\to\infty \\ = \end{array}\begin{cases} 2e^{-N\beta\varepsilon_1} & \text{if } \ e^{-\beta\varepsilon_1}>2e^{-\beta\varepsilon_2} \\ 2^N e^{-N\beta\varepsilon_2} & \text{if } \ e^{-\beta\varepsilon_1}<2e^{-\beta\varepsilon_2} \end{cases}$$

3.

$$F=-k_BT\ln Z_c=\begin{cases} N\varepsilon_1 & \text{if } \ \varepsilon_1<-k_BT\ln 2+\varepsilon_2 \\ N\varepsilon_2-Nk_BT\ln 2 & \text{if } \ \varepsilon_1>-k_BT\ln 2+\varepsilon_2 \end{cases}$$

$$U=-\frac{\partial\ln Z_c}{\partial\beta}=\begin{cases} N\varepsilon_1 & \text{if } \ \varepsilon_1<-k_BT\ln 2+\varepsilon_2 \\ N\varepsilon_2 & \text{if } \ \varepsilon_1>-k_BT\ln 2+\varepsilon_2 \end{cases}$$

4. 内能在 $T_c = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/(k_B \ln 2)$ 处突变，因此在 $T = T_c$ 时发生相变。

$$\begin{aligned} S &= (U-F)/T = \begin{cases} 0 & \text{if} \quad T < T_c \\ Nk_B \ln 2 & \text{if} \quad T > T_c \end{cases} \\ L &= T_c \Delta S = Nk_B T_c \ln 2 = N(\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \end{aligned}$$

（装订线内不要答题）