（装订线内不要答题）

中国科学技术大学物理学院
2015～2016 学年第 2 学期考试试卷

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						

一、 某系统有 N 个无相互作用的可以分辨的粒子，每个粒子可以处于两个能级上。这两个能级的能量为 0 和 ε，简并度分别为 1 和 3。

1. 求温度为 T 时体系的内能和熵。

$$z=\sum_l \omega_l e^{-\beta\varepsilon_l}=1+3e^{-\beta\varepsilon}$$
$$U=-N\frac{\partial \ln z}{\partial\beta}=\frac{3N\varepsilon e^{-\beta\varepsilon}}{1+3e^{-\beta\varepsilon}}$$
$$S=k_B(N\ln z+\beta U)=Nk_B\left[\ln(1+3e^{-\beta\varepsilon})+\frac{3\beta\varepsilon e^{-\beta\varepsilon}}{1+3e^{-\beta\varepsilon}}\right]$$

2. 求温度为 T 时体系的热容以及能量的涨落。

$$C=\frac{\partial U}{\partial T}=3Nk_B(\beta\varepsilon)^2\left[-\frac{3e^{-2\beta\varepsilon}}{(1+3e^{-\beta\varepsilon})^2}+\frac{e^{-\beta\varepsilon}}{1+3e^{-\beta\varepsilon}}\right]$$
$$=3Nk_B\frac{(\beta\varepsilon)^2e^{-\beta\varepsilon}}{(1+3e^{-\beta\varepsilon})^2}$$
$$(\Delta E)^2=N\frac{\partial^2\ln z}{\partial\beta^2}=Ck_BT^2$$

二、 动量为 $\mathbf{p}$ 的第 i 种分子的能量为 $\varepsilon_i(\mathbf{p}) = \varepsilon_i + \mathbf{p}^2/2m_i$，其中 m_i 和 ε_i 分别是该分子的质量和基态能量。分子之间的相互作用可以忽略。

1. 体积为 V 的容器里有 N_A 个 A 分子组成的气体，求温度 T 时体系的自由能，压强和化学势 μ_A。

$$
\begin{aligned}
z_A &= \int \frac{d^3p d^3x}{h^3} e^{-\beta\varepsilon_A(\mathbf{p})} = V\Big(\frac{2m_A\pi k_B T}{h^2}\Big)^{3/2} e^{-\beta\varepsilon_A} \\
Z_A &= \frac{z_A^{N_A}}{N_A!} \\
F_A &= -k_B T \ln Z_A = -k_B T\Big[N_A \ln V\Big(\frac{2m_A\pi k_B T}{h^2}\Big)^{3/2} - \beta\varepsilon_A - N_A \ln N_A + N_A\Big] \\
&= N_A\varepsilon_A - N_A k_B T \ln\frac{V}{N_A}\Big(\frac{2m_A\pi k_B T}{h^2}\Big)^{3/2} - N_A k_B T \\
p &= -\frac{\partial F}{\partial V} = \frac{N_A k_B T}{V} \\
\mu_A &= \frac{\partial F}{\partial N_A} = \varepsilon_A - k_B T \ln\frac{V}{N_A}\Big(\frac{2m_A\pi k_B T}{h^2}\Big)^{3/2}
\end{aligned}
$$

2. 体积为 V 的容器里有 N_A 个 A 分子，N_B 个 B 分子，N_C 个 C 分子组成的气体，求温度 T 时体系的自由能，压强以及这三种物质的化学势 μ_A，μ_B 和 μ_C。

$$
\begin{aligned}
Z &= Z_A Z_B Z_C = \frac{z_A^{N_A} z_B^{N_B} z_C^{N_C}}{N_A! N_B! N_C!} \\
F &= -k_B T \ln Z = F_A + F_B + F_C \\
p &= \frac{\partial F}{\partial V} = \frac{(N_A + N_B + N_C) k_B T}{V} \\
\mu_i &= \varepsilon_i - k_B T \ln\frac{V}{N_i}\Big(\frac{2\pi m_i k_B T}{h^2}\Big)^{3/2}
\end{aligned}
$$

3. 这三种物质可以发生化学反应 $A + B \to C$。达到平衡时，它们的化学势满足 $\mu_A + \mu_B = \mu_C$。求平衡时的反应常数 $K = N_C/(N_A N_B)$。

$$
\begin{aligned}
0 &= \mu_A + \mu_B - \mu_C \\
\frac{\varepsilon_A + \varepsilon_B - \varepsilon_C}{k_B T} &= \ln\frac{N_C}{N_A N_B} + \ln V\Big(\frac{2\pi m_A m_B k_B T}{m_C h^2}\Big)^{3/2} \\
K &= \frac{1}{V}\Big(\frac{h^2 m_C}{2\pi m_A m_B k_B T}\Big)^{3/2} e^{\beta(\varepsilon_A + \varepsilon_B - \varepsilon_C)}
\end{aligned}
$$

三、 在某空腔里，光子可以近似看成被约束在二维谐振子势阱中的粒子，其能量为 $\varepsilon = \varepsilon_0 + \mathbf{p}^2/(2m) + m\omega^2\mathbf{r}^2/2$，其中 $\varepsilon_0 > 0$，m 和 ω 分别是空腔中的光子的有效质量和约束频率。$\mathbf{p}$ 和 $\mathbf{r}$ 则是二维的动量和位置。

1. 求单个光子的态密度。【提示：每个光子可以有两种偏振态。】

   解法一:

   $$\begin{aligned} D(\varepsilon) &= 2\int \delta(\varepsilon - \varepsilon_0 - \mathbf{p}^2/2m - m\omega^2\mathbf{r}^2/2)\frac{d^2rd^2p}{h^2} \\ &= 2\frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{(\hbar\omega)^2} \end{aligned}$$

   解法二: 二维谐振子势的本征能量为

   $$\varepsilon_{n_x,n_y} = \varepsilon_0 + (n_x + 1/2)\hbar\omega + (n_y + 1/2)\hbar\omega = \varepsilon_0 + (n_x + n_y + 1)\hbar\omega$$

   由此，能级为 $\varepsilon_n = \varepsilon_0 + (n+1)\hbar\omega$ 时，允许的 $n_x = 0, 1, \cdots, n$。考虑到每个光子具有两种偏振，因此该能级简并度为

   $$\omega_n = 2(n+1) = 2(\varepsilon - \varepsilon_0)/(\hbar\omega)$$

   因此态密度为

   $$D(\varepsilon) = \frac{\omega_n}{\hbar\omega} = \frac{(\varepsilon - \varepsilon_0)}{(\hbar\omega)^2}$$

2. 假设已知光子的化学势为 μ，求总光子数的平均值 N 和温度 T 的关系。

   $$\begin{aligned} N &= \int \frac{D(\varepsilon)}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1}d\varepsilon = \frac{2}{(\hbar\omega)^2}\int_{\varepsilon_0}^{\infty} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1}d\varepsilon \\ &= \frac{2}{(\hbar\omega)^2}\int_0^{\infty} \frac{\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon+\varepsilon_0-\mu)} - 1}d\varepsilon \end{aligned}$$

3. 空腔中有很多可以吸收和发射光子的染料分子。由于这些染料分子的存在，平均光子数 N 保存不变，求空腔里光子发生波色—爱因斯坦凝聚时的温度。

   答:发生 BEC 时，$\mu = \varepsilon_0$

   $$\begin{aligned} N &= \frac{2}{(\hbar\omega)^2}\int_0^{\infty} \frac{\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon} - 1}d\varepsilon = 2\Big(\frac{k_BT}{\hbar\omega}\Big)^2\int_0^{\infty} \frac{x}{e^x - 1}dx \\ &= \frac{\pi^2}{3}\Big(\frac{k_BT}{\hbar\omega}\Big)^2 \end{aligned}$$

   $$T_C = \frac{\sqrt{3N}\hbar\omega}{\pi k_B}$$

4. 同题 3，求发生凝聚之后的基态上的粒子数 N_0 和温度 T 的关系。

答: BEC 后系统的化学势始终为 ε_0。因此激发态上的粒子数为 $N_{\text{ex}} = (\pi^2/3)\left(\frac{k_B T}{\hbar\omega}\right)^2$。因此 $N_0 = N - N_{\text{ex}} = N[1-(T/T_C)^2]$。

（装订线内不要答题）

四、 一半导体量子点里的电子可以处于两个简并度为 2 的能级上，能级的能量从低到高为 ε_v 和 ε_c。电子之间的相互作用可以忽略不计。

1. 已知化学势为 μ，温度为 T 时，请写出两个能级上平均电子数。

$$
\begin{aligned}
a_i &= \frac{\omega_i}{e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)}+1} \\
a_c &= \frac{2}{e^{\beta(\varepsilon_c-\mu)}+1} \\
a_v &= \frac{2}{e^{\beta(\varepsilon_v-\mu)}+1}
\end{aligned}
$$

2. 量子点里有两个电子，求温度为 0K 时，各个能级的电子占据数。

$$
\begin{aligned}
a_v &= 2 \\
a_c &= 0
\end{aligned}
$$

3. 保持量子点里的总电子数为 2，当温度变为 T 时，求各个能级的电子占据数，系统的内能以及热容。

$$
\begin{aligned}
2 &= a_c + a_v \\
2 &= \frac{2}{e^{\beta(\varepsilon_c-\mu)}+1} + \frac{2}{e^{\beta(\varepsilon_v-\mu)}+1} \\
&= 2\frac{e^{\beta(\varepsilon_v-\mu)} + e^{\beta(\varepsilon_c-\mu)} + 2}{e^{\beta(\varepsilon_v+\varepsilon_c-2\mu)} + e^{\beta(\varepsilon_v-\mu)} + e^{\beta(\varepsilon_c-\mu)} + 1} \\
1 &= e^{\beta(\varepsilon_v+\varepsilon_c-2\mu)} \\
\mu &= \frac{\varepsilon_c+\varepsilon_v}{2} \\
a_c &= \frac{2}{e^{\beta(\varepsilon_c-\mu)}+1} = \frac{2}{e^{\beta(\varepsilon_c-\varepsilon_v)/2}+1} \\
a_v &= \frac{2}{e^{\beta(\varepsilon_v-\mu)}+1} = \frac{2}{e^{-\beta(\varepsilon_c-\varepsilon_v)/2}+1} \\
&= 2 - a_c \\
U &= a_v\varepsilon_v + a_c\varepsilon_c = 2\varepsilon_v + \frac{2(\varepsilon_c-\varepsilon_v)}{e^{\beta(\varepsilon_c-\varepsilon_v)/2}+1} \\
C &= \frac{\partial U}{\partial T} = k_B\Big(\frac{\varepsilon_c-\varepsilon_v}{k_BT}\Big)^2\frac{e^{\beta(\varepsilon_c-\varepsilon_v)/2}}{[e^{\beta(\varepsilon_c-\varepsilon_v)/2}+1]^2}
\end{aligned}
$$

五、 一个系统由三个磁矩组成，体系的哈密顿量可以写成

$$\mathcal{H} = J \sum_{1\le i<j\le 3} \sigma_i\sigma_j + H\sum_{i=1}^{3}\sigma_i,$$

其中 σ_i $(1 \le i \le 3)$ 表示第 i 个磁矩，可能取值为 ± 1；$J > 0$ 是磁矩之间的相互作用的强度；H 是外磁场。

1. 求系统的能量以及磁矩 $M = \sum_i \sigma_i$ 与温度 T 的关系。

   答:系统有三个磁矩，每个磁矩可能取值为 ± 1。因此体系共有8 个可能的态。

$$\begin{aligned}
&E(+++) = 3J + 3H\\
&E(-++) = E(+-+) = E(++-) = -J + H\\
&E(--+) = E(-+-) = E(+--) = -J - H\\
&E(---) = 3J - 3H\\
&\qquad Z = \sum_{\{\sigma_i=\pm1\}} e^{-\beta\mathcal{H}} = e^{-\beta(3J+3H)} + e^{-\beta(3J-3H)} + 3e^{-\beta(-J+H)} + 3e^{-\beta(-J-H)}\\
&\qquad\quad = 2e^{-3\beta J}\cosh(3\beta H) + 6e^{\beta J}\cosh(\beta H)\\
&\qquad U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial\beta} = \frac{6}{Z}\begin{bmatrix} Je^{-3\beta J}\cosh(3\beta H) - He^{-3\beta J}\sinh(3\beta H)\\ -Je^{\beta J}\cosh(\beta H) + He^{\beta J}\sinh(\beta H)\end{bmatrix}\\
&\qquad M = \frac{-1}{\beta}\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial H}\right)_\beta\\
&\qquad\quad = \frac{2}{Z}\Big[e^{-3\beta J}\sinh(3\beta H) + 3e^{\beta J}\sinh(\beta H)\Big]
\end{aligned}$$

2. 求温度和外磁场均为零时系统的熵。

   解法一: 温度为零时，体系处于能量最低的能级上。外磁场为零时，有六个态的能量为 $-J$，利用 Boltzmann 关系，

$$S = k_B \ln 6$$

   解法二: 利用 $S = k_B(\ln Z + \beta U)$，得到相同结果。

（装 订 线 内 不 要 答 题）

六、 一氧化碳分子转动自由度的能级为 $\varepsilon_l = l(l+1)k_B\Theta_r$，简并度为 $2l+1$，其中 $l=0,1,2,\cdots$ 是角动量量子数，k_B 是玻尔兹曼常数，$\Theta_r = 2.77$ K 是其转动自由度的特征温度。

1. 请写出温度为 T 时的转动自由度的单粒子配分函数。

$$z = \sum_l (2l+1)e^{-l(l+1)\Theta_r/T}$$

2. 频率为 ν 的入射光可以和角动量量子数为 l 的分子发生拉曼散射，出射光的频率可以为 $\nu-(4l+6)k_B\Theta_r/h$ 或者 $\nu+[4(l-2)+6]k_B\Theta_r/h$（当 $l \geq 2$ 时），h 为普朗克常数。这些出射光的强度和角动量量子数为 l 的分子数成正比。求出射频率为 $\nu_-(l) = \nu-(4l+6)k_B\Theta_r/h$ 和 $\nu_+(l) = \nu+(4l+6)k_BT\Theta_r/h$ 的光强比例和温度 T 的关系。

答:角动量为 l 的分子数为

$$a_l = \frac{N}{z}(2l+1)e^{-l(l+1)\Theta_r/T}$$

频率为 $\nu_-(l)$ 的出射光是是受到角动量为 l 的分子的散射，频率为 $\nu_+(l)$ 的出射光是是受到角动量为 $l+2$ 的分子的散射，因此两个频率出射光的强度比例为

$$\frac{I[\nu_-(l)]}{I[\nu_+(l)]} = \frac{a_l}{a_{l+2}} = \frac{(2l+1)e^{-l(l+1)\Theta_r/T}}{(2l+5)e^{-(l+2)(l+3)\Theta_r/T}} = \frac{2l+1}{2l+5}e^{(4l+6)\Theta_r/T}$$

3. 求室温下（$T=300$ K）光强最大的出射光频率和入射光频率之差。

答:分子数最多的角动量 $l_{\max}$ 满足

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial a_l}{\partial l} = \frac{N}{z}\Big[2e^{-l(l+1)\Theta_r/T} - (2l+1)^2(\Theta_r/T)e^{-l(l+1)\Theta_r/T}\Big] \\ l_{\max} &= \sqrt{\frac{T}{2\Theta_r}} - \frac{1}{2} = 6.86 \simeq 7 \end{aligned}$$

由此，光强最大的出射光和入射光频率差为 $\Delta\nu = -(4l_{\max}+6)k_B\Theta_r/h$ 或者 $\Delta\nu = (4l_{\max}-2)k_B\Theta_r/h$。