中国科学技术大学物理学院
2022 ~ 2023 学年第二学期考试试卷

课程名称： **热力学与统计物理（A）**　　　**课程代码：** ______________

开课院系： **物理学院**　　　**考试形式：** **闭卷**

姓名： ________________　**学号：** ________________　**专业：** ________________

一、　一个系统中有 N 个可分辨的粒子，每个粒子可以处在 $|0\rangle$ 和 $1\rangle$ 两个量子态上。这两个态的能量分别是 0 和 ε。体系的温度为 T。

1. 求系统的内能 U 和熵 S。
2. 量子态能量不变，求系统的热容。
3. 求系统中处于 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 两个态的粒子数 n_0 和 n_1 的平均值。
4. 求粒子数 n_0 和 n_1 的涨落。

参考答案：

1.

$$
\begin{aligned}
z &= 1 + e^{-\beta\varepsilon} \\
U &= -N\Big(\frac{\partial \ln z}{\partial \beta}\Big) = \frac{N\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon}+1} \\
S &= Nk_B \ln z + \frac{U}{T} = Nk_B \ln(1+e^{-\beta\varepsilon}) + Nk_B \frac{\beta\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon}+1}
\end{aligned}
$$

2.

$$
C = \Big(\frac{\partial U}{\partial T}\Big) = Nk_B\Big(\frac{\varepsilon}{k_B T}\Big)^2 \frac{e^{\beta\varepsilon}}{(e^{\beta\varepsilon}+1)^2}
$$

3.

$$
\begin{aligned}
U &= \overline{n_0 \times 0 + n_1 \times \varepsilon} = \overline{n_1}\varepsilon \\
\overline{n_1} &= U/\varepsilon = N\frac{1}{e^{\beta\varepsilon}+1} \\
\overline{n_0} &= \overline{N - n_1} = N_1 - \overline{n_1} = N\frac{e^{\beta\varepsilon}}{e^{\beta\varepsilon}+1}
\end{aligned}
$$

4.

$$
\begin{aligned}
\Delta n_1^2 &= \left(\frac{\partial n_1}{\partial(-\beta\varepsilon)}\right) = N\frac{e^{\beta\varepsilon}}{(e^{\beta\varepsilon}+1)^2} \\
\Delta n_0^2 &= \overline{n_0^2} - \overline{n_0}^2 = \overline{(N-n_1)^2} - (N - \overline{n_1})^2 \\
&= \overline{N^2 - 2Nn_1 + n_1^2} - (N^2 - 2N\overline{n_1} + \overline{n_1}^2) \\
&= (N^2 - 2N\overline{n_1} + \overline{n_1^2} - (N^2 - 2N\overline{n_1} + \overline{n_1}^2) \\
&= \overline{n_1^2} - \overline{n_1}^2 = \Delta n_1^2 = N\frac{e^{\beta\varepsilon}}{(e^{\beta\varepsilon}+1)^2}
\end{aligned}
$$

（装订线内不要答题）

二、 吸附在固体表面上的氢分子可以绕垂直于表面的轴（z-轴）转动。这种转动的本征态可以用角动量量子数 l_z 表征，相应的本征能量为 $\varepsilon_{l_z} = \hbar^2 l_z^2/(2I)$。其中 I 为转动惯量，角动量量子数的取值范围是 $l_z = 0, \pm1, \pm2, \cdots$ 。假设有 N 个氢分子被吸附在表面，系统温度为 T。不考虑分子直接的相互作用。

1. 请写出这种氢气分子的转动自由度的单粒子配分函数。
2. 请写出 $|l_z| = 1$ 和 $l_z = 0$ 氢分子粒子数之比。
3. 求在高温极限下（$k_B T \gg \hbar^2/(2I)$）转动自由度对内能和热容的贡献。

参考答案:

1.

$$z = \sum_{l_z=-\infty}^{\infty} e^{-\hbar^2 l_z^2/(2Ik_BT)} = \sum_{l_z=-\infty}^{\infty} e^{-l_z^2\Theta_r/T} \qquad \Theta_r = \hbar^2/(2Ik_B)$$

2.

$$\frac{a_{|l_z|=1}}{a_{l_z=0}} = \frac{a_{l_z=1} + a_{l_z=-1}}{a_{l_z=0}} = \frac{2e^{-1^2\Theta_r/T}}{e^{-0^2\Theta_r/T}} = 2e^{-\Theta_r/T}$$

3.

$$z = \int_{-\infty}^{\infty} dl_z e^{-l_z^2\Theta_r/T} = \sqrt{\frac{T}{\Theta_r}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} = \sqrt{\frac{\pi T}{\Theta_r}}$$
$$U = Nk_BT^2\Big(\frac{\partial \ln z}{\partial T}\Big) = Nk_BT^2\frac{1}{2T} = \frac{1}{2}Nk_BT$$
$$C = \Big(\frac{\partial U}{\partial T}\Big) = \frac{1}{2}Nk_B$$

三、 低温低密度时，二维电子会在空间中规则地排列成三角格子，形成 Wigner 晶体。Wigner 晶体的振动模式可以用声子描述，其色散关系为 $\varepsilon(\mathbf{p}) = c\sqrt{|\mathbf{p}|}$，其中 c 是常数，$\mathbf{p}$ 是声子（准）动量。声子是玻色子，服从玻色统计。在二维中，声子具有两种模式，分别对应横波和纵波。

1. 求单位面积里声子态密度。
2. 求单位面积里声子的总能量和温度 T 的关系。
3. 求单位面积里声子的热容和温度的关系。

参考答案：

1.

$$
\begin{aligned}
g(\varepsilon) &= 2\int \delta[\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{p})]\frac{d^2p d^2r}{h^2} = \frac{4\pi}{h^2}\int \delta(\varepsilon - c\sqrt{p})pdp \\
&= \frac{4\pi}{h^2}\frac{p}{cp^{-1/2}/2}\Big|_{p=(\varepsilon/c)^2} = \frac{8\pi}{h^2c^4}\varepsilon^3
\end{aligned}
$$

2. 低温下

$$
\begin{aligned}
U &= \int_0^\infty \varepsilon g(\varepsilon)\frac{1}{e^{\beta\varepsilon}-1}d\varepsilon = \frac{8\pi}{h^2c^4}\int_0^\infty \frac{\varepsilon^4}{e^{\beta\varepsilon}-1}d\varepsilon \\
&= \frac{8\pi}{h^2c^4}(k_BT)^5\int_0^\infty \frac{x^4}{e^x-1}dx \propto T^5
\end{aligned}
$$

3.

$$
C = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right) = \frac{40\pi}{h^2c^4}k_B^5T^4\int_0^\infty \frac{x^4}{e^x-1}dx \propto T^4
$$

四、　一个晶格里有 N 个格点，不考虑不同格点的耦合，每个格点的能量为

$$E = (n_\uparrow + n_\downarrow)\varepsilon + U n_\uparrow n_\downarrow,$$

其中 ε 和 U 分别是单电子能量以及 Coulomb 相互作用能量，都是大于零的常数。$n_\uparrow$ 和 $n_\downarrow$ 则是这个格点上自旋向上和自旋向下电子数目。由于 Pauli 不相容原理，$n_\uparrow$ 和 $n_\downarrow$ 只能是 0 或者 1。

1. 求系统温度为 T、化学势为 μ 时，每个格点上的平均电子数 $n = \overline{n_\uparrow + n_\downarrow}$。画出温度为零时 n 和 μ 的关系。
2. 证明每个格点上 $\overline{n_\uparrow^2} = \overline{n_\uparrow}$ 。
3. 请计算局域磁矩 $m^2 = \overline{(n_\uparrow - n_\downarrow)^2}$。
4. 画出温度为零时 m 和 μ 的关系。

参考答案：

1.

$$\Xi = [1 + 2e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} + e^{-\beta(2\varepsilon+U-2\mu)}]^N$$

$$n = \frac{1}{N}\left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial - \beta\varepsilon}\right) = \frac{2e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} + 2e^{-\beta(2\varepsilon+U-2\mu)}}{1 + 2e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} + e^{-\beta(2\varepsilon+U-2\mu)}}$$

$$\overset{\beta=\infty}{=} \begin{cases} 0 & \mu < \varepsilon \\ 1 & \varepsilon < \mu < 2\varepsilon + U \\ 2 & \mu > 2\varepsilon + U \end{cases}$$

2. 因为 $n_\uparrow$ 只能是 0 或者 1，这两个值都满足 $n_\uparrow^2 = n_\uparrow$，所以 $\overline{n_\uparrow^2} = \overline{n_\uparrow}$。同理，$\overline{n_\downarrow^2} = \overline{n_\downarrow}$。

3-4.

$$\begin{aligned}
m^2 &= \overline{(n_\uparrow - n_\downarrow)^2} = \overline{n_\uparrow^2 + n_\downarrow^2 - 2n_\uparrow n_\downarrow} \\
&= \overline{n_\uparrow + n_\downarrow} - 2\overline{n_\uparrow n_\downarrow} = \overline{n} - 2\left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial - \beta U}\right) \\
&= \frac{2e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} + 2e^{-\beta(2\varepsilon+U-2\mu)}}{1 + 2e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} + e^{-\beta(2\varepsilon+U-2\mu)}} - 2\frac{e^{-\beta(2\varepsilon+U-2\mu)}}{1 + 2e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} + e^{-\beta(2\varepsilon+U-2\mu)}} \\
&= \frac{2e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}}{1 + 2e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} + e^{-\beta(2\varepsilon+U-2\mu)}}
\end{aligned}$$

$$= \begin{cases} 0 & \mu < \varepsilon \\ 1 & \varepsilon < \mu < 2\varepsilon + U \\ 0 & \mu > 2\varepsilon + U \end{cases}$$

五、 一个底面积为 A，高度为 H 的圆柱形容器内有由 N 个质量为 M 的原子组成的气体。系统温度为 T。假设高度 H 不大，重力加速度 g 保持不变。

1. 在不考虑重力时，求体系的等容热容。
2. 求系统的内能 U。
3. 求系统的等容热容 $C_{A,H}$。
4. 利用以上结果，解释为何在实验室中研究气体性质时通常不需要考虑重力的影响。典型气体原子质量 $m \sim 5\times10^{-26}$ kg，$k_B = 1.38\times10^{-23}$ J/K。

参考答案：

1. 不考虑重力的影响，

$$
\begin{aligned}
\varepsilon &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \\
z &= \int e^{-\beta\varepsilon(\mathbf{p})}\frac{d^3pd^3r}{h^3} = AH\Big(\frac{2\pi mk_BT}{h^2}\Big)^{3/2} \\
U &= Nk_BT^2\Big(\frac{\partial\ln z}{\partial T}\Big) = 3Nk_BT/2 \\
C_{AH} &= \Big(\frac{\partial U}{\partial T}\Big)_{AH} = \frac{3Nk_B}{2}
\end{aligned}
$$

2.

$$
\begin{aligned}
&\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{p},\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + mgz \\
&z = \int e^{-\beta\varepsilon(\mathbf{p},\mathbf{r})}\frac{d^3pd^3r}{h^3} = \frac{4\pi A}{h^3}\int_0^\infty e^{-p^2/(2mk_BT)}p^2dp\int_0^H e^{-mgz/(k_BT)}dz \\
&\quad = \frac{4\pi A}{h^3}(2mk_BT)^{3/2}\int_0^\infty x^2e^{-x^2}dx \times (k_BT/mg)\int_0^{mgH/k_BT} e^{-t}dt \\
&\quad = A\Big(\frac{2\pi mk_BT}{h^2}\Big)^{3/2}\frac{k_BT\big(1-e^{-mgH/k_BT}\big)}{mg} \\
&\quad = A\Big(\frac{2\pi mk_BT}{h^2}\Big)^{3/2}\frac{k_BT\big(1-e^{-\Theta_H/T}\big)}{mg} \qquad\qquad \Theta_H = mgH/k_B \\
&U = Nk_BT^2\Big(\frac{\partial\ln z}{\partial T}\Big) = Nk_BT^2\Big(\frac{3}{2}\frac{1}{T} + \frac{1}{T} - \frac{\Theta_H}{T^2}\frac{e^{-\Theta_H/T}}{1-e^{-\Theta_H/T}}\Big) \\
&\quad = \frac{5Nk_BT}{2} - Nk_B\Theta_H\frac{1}{e^{\Theta_H/T}-1}
\end{aligned}
$$

3.

$$
C_{AH} = \Big(\frac{\partial U}{\partial T}\Big)_{AH} = \frac{5Nk_B}{2} - Nk_B\Big(\frac{\Theta_H}{T}\Big)^2\frac{e^{\Theta_H/T}}{(e^{\Theta_H/T}-1)^2}
$$

4. 在实验室里，$H \sim 1$ m，$\Theta_H = mgH/k_B \sim 0.05$ K。因此一般有 $\Theta_H/T \ll 1$，

$$U \simeq \frac{5Nk_BT}{2} - Nk_B\Theta_H \frac{1}{\Theta_H/T} = \frac{3Nk_BT}{2}$$

$$C_{AH} \simeq \frac{5Nk_B}{2} - Nk_B\left(\frac{\Theta_H}{T}\right)^2 \frac{1}{(\Theta_H/T)^2} = \frac{3Nk_B}{2}$$

因此在实验室中可以忽略重力的作用。