

А.С. Кондратьев
П.А. Райгородский

ЗАДАЧИ

ПО ТЕРМОДИНАМИКЕ, СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ И КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ

Допущено Учебно-методическим объединением по направлениям педагогического образования Министерства образования и науки РФ в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению 540200 (050200) Физико-математическое образование



МОСКВА
ФИЗМАТЛИТ®
2007

УДК 536
ББК 22.317
К 64

Кондратьев А. С., Райгородский П. А. **Задачи по термодинамике, статистической физике и кинетической теории.** — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. — 256 с. — ISBN 978-5-9221-0876-8.

Сборник задач соответствует современному курсу статистической физики для студентов физических специальностей вузов.

Наряду с классическими задачами впервые рассматриваются задачи по теории квантовых жидкостей, которая широко применяется в настоящее время в физике твердого тела, физике металлов, физике магнитных явлений, ядерной физике и астрофизике. Для большинства задач приведены подробные решения.

Допущено Учебно-методическим объединением по направлениям педагогического образования Министерства образования и науки РФ в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению 540200 (050200) Физико-математическое образование.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	5
Список обозначений	7
Глава 1. Феноменологическая термодинамика	9
§ 1.1. Основные термодинамические соотношения	9
§ 1.2. Термодинамика диэлектриков и магнетиков	11
Задачи	13
Задачи для самостоятельного решения.	44
Глава 2. Равновесная статистика классических и квантовых систем	45
§ 2.1. Статистические ансамбли и статистические суммы	45
§ 2.2. Классические и квантовые функции распределения	47
Задачи	51
Задачи для самостоятельного решения.	80
Глава 3. Равновесная статистическая механика квантовых газов	81
§ 3.1. Ферми- и бозе-газы.	81
§ 3.2. Смешанное представление в квантовой статистической механике.	83
Задачи	84
Задачи для самостоятельного решения.	123
Глава 4. Равновесная статистическая механика квантовых жидкостей. Квантовые ферми- и бозе-жидкости	124
§ 4.1. Нормальная ферми-жидкость.	124
§ 4.2. Сверхтекучая бозе-жидкость	126
Задачи	127
Задачи для самостоятельного решения.	145
Глава 5. Теория флуктуаций	147
§ 5.1. Элементарный расчет флуктуаций	147
§ 5.2. Гауссова квазитермодинамическая теория флуктуаций	147
§ 5.3. Статистическая теория флуктуаций	149
§ 5.4. Описание динамических систем с флуктуирующими параметрами	150
Задачи	152
Задачи для самостоятельного решения.	176
Глава 6. Динамический подход к теории неравновесных явлений	177
§ 6.1. Статистическое описание неравновесных систем	177
§ 6.2. Уравнения Лиувилля и Неймана	177
§ 6.3. Приближение самосогласованного поля	178
Задачи	180
Задачи для самостоятельного решения.	209

Глава 7. Описание неравновесных явлений с помощью управляющих уравнений	210
§ 7.1. Кинетическое уравнение Больцмана	210
§ 7.2. Уравнение кинетического баланса Паули	211
§ 7.3. Уравнение Фоккера—Планка	211
§ 7.4. Кинетические явления в квантовых жидкостях	212
Задачи	215
§ 7.5. Задачи для самостоятельного решения.	251
Список литературы	252

Предисловие

Изучение статистической физики происходит на завершающем этапе общего физического образования, одинакового для всех конкретных специализаций, по которым происходит подготовка на физических факультетах университетов и технических вузов с углубленным изучением физики. Уверенное владение методами статистической физики и способность к решению соответствующих задач составляют неотъемлемую часть полноценного образования. Вторгаясь в самые разнообразные разделы современной науки, не только собственно в физике, но и в химии, биологии, медицине, социологии и т. д., статистическая физика в настоящее время играет все более активную и важную роль в развитии методологии научных исследований.

Изучение статистической физики, как правило, осуществляется на IV курсе, причем практически схема изучения реализуется либо в одном объединенном курсе, содержащем феноменологическую термодинамику, статистическую механику и кинетическую теорию, либо в двух, а иногда и в трех отдельных курсах, содержащих эти части. В качестве учебного материала в различных вузах используются различные пособия, список которых приведен в конце книги. Практические занятия по решению задач проводятся в течение одного или двух семестров. При этом студенты сталкиваются с весьма сложной проблемой овладения современными методами решения конкретных задач по весьма широкому кругу вопросов. Имеющиеся в настоящее время учебные пособия по решению задач («Термодинамика и статистическая физика» Р. Кубо, «Задачи по термодинамике и статистической физике» под ред. П. Ландсберга, «Сборник задач по теоретической физике» под ред. А. А. Сенкевича и др.) не могут обеспечить решение проблемы, ибо, во-первых, не удовлетворяют основному принципу — отбору относительно небольшого количества задач, на которых можно уверенно отработать необходимые навыки использования современных методов, а во-вторых, содержащийся в них материал в определенной степени устарел. Не удовлетворило в достаточной степени решению сформулиро-

ванной проблемы и пособие «Задачи по статистической физике» А. С. Кондратьева и В. П. Романова, изданное «Физматлитом» в 1992 г., в первую очередь, благодаря тому, что содержало, по мнению коллег, в основном слишком сложные задачи, большинство которых оказалось недоступным для студентов, специализирующихся по экспериментальной физике. Далее, за прошедшие 15 лет некоторые вопросы, такие, как метод Монте-Карло и метод молекулярной динамики, оказались выведенными из курсов статистической физики и в настоящее время составляют предмет различных спецкурсов в бурно развивающейся вычислительной физике.

Настоящее пособие полностью переработано по сравнению с указанным пособием, оно в полтора раза превышает его по объему — 150 задач вместо 100. Содержание пособия обновлено наполовину. Исключены разделы, посвященные методу Монте-Карло и методу молекулярной динамики; исключено более 20 задач, посвященных достаточно узким специальным вопросам. Исключен раздел, посвященный устаревшей теории фазовых переходов Ландау.

Во все разделы пособия добавлены 70 новых задач разной степени сложности, которые вместе с оставшимися составляют более широкий спектр по охвату предмета, что должно сделать пособие пригодным для студентов, специализирующихся как по теоретической, так и по экспериментальной физике. Добавлен раздел, посвященный рассмотрению равновесных свойств квантовых ферми- и бозе-жидкостей в рамках феноменологических теорий Ландау и Ландау—Силина. В раздел, посвященный физике неравновесных явлений, добавлены задачи, в которых рассматриваются кинетические свойства квантовых жидкостей. Теория квантовых жидкостей занимает все более важное место в различных разделах физики — теории твердого тела, физике металлов, теории магнитных явлений, теории ядра, астрофизике и т. д., поэтому включение указанных вопросов в пособие по решению задач по статистической физике является актуальным и своевременным.

Список обозначений ¹⁾

$U, \langle E \rangle, E$	— внутренняя энергия
S	— энтропия
V	— объем
p	— давление
μ	— химический потенциал
N	— число частиц
T	— температура
F	— свободная энергия Гельмгольца
W	— тепловая функция (энтальпия)
Φ	— термодинамический потенциал (свободная энергия Гиббса)
Ω	— большой термодинамический потенциал
v	— внутренняя энергия единицы объема ($v = U/V$)
s	— энтропия единицы объема ($s = S/V$)
ρ	— плотность ($\rho = Nm/V$)
ζ	— химический потенциал единицы массы
m	— масса частицы
E	— вектор напряженности электрического поля
D	— вектор электрической индукции
P	— вектор поляризации
H	— вектор напряженности магнитного поля
B	— вектор магнитной индукции
M	— вектор намагниченности
$\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p$	— коэффициент теплового расширения (изобарический)
C_p	— теплоемкость при постоянном давлении
C_V	— теплоемкость при постоянном объеме
δQ	— количество теплоты
v	— скорость движения
$K_T = -V \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T$	— изотермический модуль упругости
u	— скорость распространения продольного звука
c_p	— теплоемкость единицы объема ($c_p = C_p/V$)

¹⁾ Обозначения величин, встречающихся только один раз, приведены в соответствующих задачах.

c_E	— теплоемкость единицы объема при постоянном E
c_D	— теплоемкость единицы объема при постоянном D
ε	— диэлектрическая проницаемость
f	— свободная энергия единицы объема ($f = F/V$)
M	— масса системы
C_E	— теплоемкость системы при постоянном E
$\beta_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T$	— изотермическая сжимаемость
k	— постоянная Больцмана
E_n	— энергия системы в состоянии с квантовым числом n
Q	— статистическая сумма канонического ансамбля
Q_N	— статистическая сумма канонического ансамбля системы из N частиц
$H(q, p)$	— функция Гамильтона
\hbar	— постоянная Планка ($\hbar = \frac{h}{2\pi}$)
\mathcal{L}	— статистическая сумма большого канонического ансамбля
E_{nN}	— энергия системы N частиц, находящейся в квантовом состоянии n
$\rho(E)$	— плотность состояний
\hat{H}	— оператор Гамильтона
$\hat{\rho}$	— статистический оператор
w_n	— квантовая функция распределения
$w(E)$	— функция распределения в энергетическом представлении
$V(\mathbf{r})$	— потенциальная энергия
$n(\mathbf{r})$	— функция распределения по координатам
Z	— конфигурационный интеграл
$f(p)$	— функция распределения по импульсам
c	— скорость света
$\varepsilon(p)$	— энергия частицы как функция импульса
$\hat{\sigma}$	— спиновый оператор Паули
σ	— спиновое квантовое число
μ	— магнетон Бора
$\hat{\sigma}_i$	— матрица Паули
N_λ	— число заполнения квантового состояния λ
$F_k(\eta)$	— интеграл Ферми—Дирака
ε_F	— энергия Ферми
μ_0	— химический потенциал, термодинамически сопряженный числу частиц

ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА**§ 1.1. Основные термодинамические соотношения**

Термодинамика устанавливает точные соотношения между различными макроскопическими параметрами системы, т. е. различными экспериментально измеряемыми характеристиками. Для вычисления таких характеристик необходимо привлекать уравнение состояния, получаемое на основе статистического подхода или данных эксперимента.

Если в задаче требуется выяснить, как изменяется определенная физическая величина x при изменении величины y в процессе, при котором остаётся постоянной величина z , то дело сводится к вычислению частной производной $\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z$. В термодинамике устанавливается связь этой производной с производными от других физических величин по, вообще говоря, другим переменным, т. е. устанавливаются термодинамические тождества.

Получение термодинамических тождеств основано на использовании фундаментального равенства Гиббса, которое имеет вид

$$dU = TdS - pdV + \mu dN. \quad (1.1)$$

Внутренняя энергия U , рассматриваемая как функция S , V и N , называется термодинамическим потенциалом. При этом говорят, что она задана в своих естественных переменных. Поскольку, например, $\frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V} = \frac{\partial^2 U}{\partial V \partial S}$, то из (1.1) следует

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_{S,N} &= -\left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_{V,N}, \\ \left(\frac{\partial T}{\partial N}\right)_{S,V} &= \left(\frac{\partial \mu}{\partial S}\right)_{V,N}, \\ \left(\frac{\partial p}{\partial N}\right)_{S,V} &= -\left(\frac{\partial \mu}{\partial V}\right)_{S,N}. \end{aligned} \quad (1.2)$$

На практике бывает удобно перейти к термодинамическим потенциалам с другими естественными переменными. Они получаются с помощью преобразований Лежандра

$$\begin{aligned} F(T, V, N) &= U - TS, \\ W(S, p, N) &= U + pV, \\ \Phi(T, p, N) &= U + pV - TS, \\ \Omega(T, V, \mu) &= U - TS - \mu N. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Можно построить и другие потенциалы, например $\Lambda = U - \mu N$, однако практически они не используются. Из определений (1.3) с учетом (1.1) следуют равенства

$$\begin{aligned} dF &= -SdT - pdV + \mu dN, \\ dW &= Vdp + TdS + \mu dN, \\ d\Phi &= Vdp - SdT + \mu dN, \\ d\Omega &= -SdT - pdV - Nd\mu. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Из равенств (1.4) следуют аналоги равенств (1.2); например, из первого равенства (1.4) имеем

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{T,N} &= \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,N}, \\ \left(\frac{\partial S}{\partial N}\right)_{T,V} &= -\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{V,N}, \\ \left(\frac{\partial p}{\partial N}\right)_{T,V} &= -\left(\frac{\partial \mu}{\partial V}\right)_{T,N}. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Практически переход от одних термодинамических переменных к другим удобно производить, используя определители — якобианы перехода

$$\frac{\partial(u, v)}{\partial(x, y)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{vmatrix}. \quad (1.6)$$

С их помощью частные производные записываются в виде

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_y = \frac{\partial(u, v)}{\partial(x, y)}, \quad (1.7)$$

а переход от одних переменных к другим осуществляется следующим образом:

$$\frac{\partial(u, v)}{\partial(x, y)} = \frac{\partial(u, v)}{\partial(t, s)} \frac{\partial(t, s)}{\partial(x, y)}. \quad (1.8)$$

При практическом использовании метода якобианов выбирать новые переменные t и s следует таким образом, чтобы возникающие производные от термодинамических функций выражались через экспериментально измеряемые величины, т. е. через естественные переменные термодинамических потенциалов. Именно эти величины (p , V , T , S , N) и входят в уравнения состояния. Через энтропию S выражаются экспериментально измеряемые теплоемкости системы при различных условиях. В результате замены переменных возникают производные типа $\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T$, $\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V$ и т. д.

Если три величины x , y и z связаны функциональной зависимостью $f(x, y, z) = 0$, то удобно использовать следующее тождество:

$$\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x = -1. \quad (1.9)$$

Поскольку часто рассматриваются системы с фиксированным числом частиц, то соотношения (1.1)–(1.5) переписывают с учетом этого факта. Например,

$$dU = TdS - pdV, \quad \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_V. \quad (1.10)$$

В гидродинамике и при рассмотрении неоднородных систем используются удельные характеристики системы, т. е. значения физических величин, отнесенных к единице массы. В этом случае, например, вместо (1.1) имеем

$$de = \frac{p}{\rho^2} d\rho + Tds,$$

где e и s — энергия и энтропия единицы массы, $\rho = \frac{Nm}{V}$, m — масса одной частицы, N — число частиц. Отсутствие слагаемого, аналогичного μdN , объясняется тем, что в однокомпонентной системе единица массы содержит фиксированное число частиц.

Подобным образом записываются аналоги соотношений (1.4).

§ 1.2. Термодинамика диэлектриков и магнетиков

При наличии электрического поля \mathbf{E} выражение для дифференциала внутренней энергии единицы объема системы u записывается в виде

$$du = Tds + \zeta d\rho + \frac{1}{4\pi} \mathbf{E}d\mathbf{D}, \quad (1.11)$$

где $\zeta = \frac{\mu}{m}$ — химический потенциал, отнесенный к единице массы, m — масса частицы, $\rho = \frac{Nm}{V}$, \mathbf{D} — индукция электрического поля.

Плотность энергии u в (1.11) — это полная плотность энергии системы, изменение которой определяется теплопередачей, изменением числа частиц и изменением электрического заряда. Наряду с u можно рассматривать функцию

$$u_1 = u - \frac{1}{4\pi} \mathbf{E}\mathbf{D}, \quad (1.12)$$

которая получается из u преобразованием Лежандра по переменным \mathbf{E} и \mathbf{D} . Поэтому

$$du_1 = Tds + \zeta d\rho - \frac{1}{4\pi} \mathbf{D}d\mathbf{E}. \quad (1.13)$$

Можно в явном виде выделить из u плотность энергии электрического поля

$$u_2 = u - \frac{E^2}{8\pi}. \quad (1.14)$$

Тогда, учитывая, что $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$, где \mathbf{P} — поляризация, имеем с помощью (1.11)

$$du_2 = Tds + \zeta d\rho + \mathbf{E}d\mathbf{P}. \quad (1.15)$$

Наконец, преобразуя u_2 по Лежандру в отношении переменных \mathbf{E} и \mathbf{P} , имеем

$$u_3 = u_2 - \mathbf{P}\mathbf{E}. \quad (1.16)$$

Соответственно

$$du_3 = Tds + \zeta d\rho - \mathbf{P}d\mathbf{E}. \quad (1.17)$$

Остальные термодинамические потенциалы получаются с помощью равенств (1.11)–(1.17) на основе общих соотношений (1.3).

Функциям u_2 и u_3 можно дать наглядную интерпретацию в соответствии с характером описываемой ими части плотности полной энергии системы u . Например, u_2 описывает плотность энергии системы за вычетом плотности энергии электрического поля. Использование функции u_1 вместо u соответствует ситуации, когда полный электрический заряд системы остается неизменным, а изменяются электрические потенциалы.

Выбор функций u , u_1 , u_2 и u_3 определяется тем, какая часть энергии электрически заряженной системы рассматривается в конкретной задаче.

Термодинамические соотношения для магнетиков весьма сходны с аналогичными соотношениями для диэлектриков.

Выражение для дифференциала внутренней энергии единицы объема имеет вид

$$du = Tds + \zeta d\rho + \frac{1}{4\pi} \mathbf{H}d\mathbf{B}. \quad (1.18)$$

Наряду с u рассматривается также термодинамический потенциал

$$u_1 = u - \frac{1}{4\pi} \mathbf{H}\mathbf{B}, \quad (1.19)$$

так что

$$du_1 = Tds + \zeta d\rho - \frac{1}{4\pi} \mathbf{B}d\mathbf{H}. \quad (1.20)$$

Можно выделить в явном виде плотность энергии магнитного поля в отсутствие магнетика:

$$u_2 = u - \frac{H^2}{8\pi}. \quad (1.21)$$

Тогда, учитывая соотношение

$$\mathbf{B} = \mathbf{H} + 4\pi\mathbf{M},$$

где \mathbf{H} — напряженность магнитного поля, имеем

$$du_2 = Tds + \zeta d\rho + \mathbf{H}d\mathbf{M}. \quad (1.22)$$

Преобразуем u_2 по Лежандру в отношении переменных \mathbf{M} и \mathbf{H} :

$$u_3 = u_2 - \mathbf{M}\mathbf{H}. \quad (1.23)$$

Теперь для du_3 следует

$$du_3 = Tds + \zeta d\rho - \mathbf{M}d\mathbf{H}. \quad (1.24)$$

Иногда в явном виде выделяют плотность энергии магнитного поля при наличии магнетика

$$u'_2 = u - \frac{B^2}{8\pi}. \quad (1.25)$$

В этом случае для дифференциала u'_2 имеем

$$u'_2 = Tds + \zeta d\rho - \mathbf{M}d\mathbf{B}. \quad (1.26)$$

Задачи

1. Нулевым началом термодинамики называется утверждение о существовании функции состояния системы — температуры T , которая имеет одинаковое значение для всех систем

или частей одной системы, находящихся в равновесии между собой. Это утверждение является следствием экспериментального факта — транзитивности термодинамического равновесия. Используя свойство транзитивности, докажите существование такой функции.

Решение. Рассмотрим простейшую термодинамическую систему, описываемую макроскопическими параметрами p и V . В состоянии равновесия между двумя системами A и B между значениями этих параметров для каждой системы p_A, V_A и p_B, V_B должно существовать определенное соотношение, которое можно записать в виде

$$F_1(p_A, V_A; p_B, V_B) = 0. \quad (1.27)$$

Транзитивность равновесия означает следующее: если система A находится в равновесии с системой B , а система B — с системой C , то система A также находится в равновесии с системой C . Это значит, что при выполнении соотношения (1.27) и соотношения

$$F_2(p_B, V_B; p_C, V_C) = 0 \quad (1.28)$$

должно выполняться и третье соотношение:

$$F_3(p_A, V_A; p_C, V_C) = 0. \quad (1.29)$$

Можно сформулировать это утверждение и несколько иначе: из любых двух соотношений (1.27)–(1.29) должно следовать третье. Это возможно лишь тогда, когда эти три уравнения равносильны следующим:

$$f_A(p_A, V_A) = f_B(p_B, V_B) = f_C(p_C, V_C) = \Theta. \quad (1.30)$$

Действительно, выбирая функцию F_1 в виде

$$F_1 = f_A(p_A, V_A) - f_B(p_B, V_B) \quad (1.31)$$

и аналогичным образом функции F_2 и F_3 , приходим к уравнениям (1.30). Величина Θ называется эмпирической температурой, а любое из уравнений (1.30) — термическим уравнением состояния соответствующей термодинамической системы.

2. Покажите логическую эквивалентность формулировок Клаузиуса (К) и Томсона (Т) второго начала термодинамики.

К: Невозможно осуществить такой процесс, единственным результатом которого был бы переход теплоты от тела с меньшей температурой T_2 к телу с большей температурой T_1 .

Т: Невозможно осуществить периодически действующий тепловой двигатель, который все взятое у нагревателя с температу-

рой T_1 тепло целиком превращал бы в работу, ничего не отдавая холодильнику с температурой T_2 : $T_2 < T_1$.

Решение. Эквивалентность (обе формулировки либо верны, либо обе неверны) доказывается простым рассуждением от противного. Пусть утверждение Томсона верно, а утверждение Клаузиуса неверно. Рассмотрим тепловой двигатель, получающий от нагревателя теплоту Q_1 при температуре T_1 и отдающий холодильнику теплоту Q_2 при температуре T_2 . Разность $A = Q_1 - Q_2$ соответствует работе, совершаемой тепловым двигателем. Неверность утверждения Клаузиуса позволяет провести некоторый процесс между холодильником и нагревателем, единственным результатом которого будет переход (за тоже время) количества теплоты Q_2 от холодильника к нагревателю. В результате эффективно нагреватель отдает количество теплоты, равное $Q_1 - Q_2$, которое окажется целиком переведенным в работу, так как холодильнику эффективно ничего не передается. Но такое комбинированное устройство невозможно, поскольку оно противоречит утверждению Томсона, которое по предположению справедливо. Итак, комбинация, когда К неверно, а Т — верно, невозможна. Аналогично доказывается невозможность обратной комбинации, когда Т верно, а К — неверно.

3. Второе начало термодинамики может быть сформулировано в виде принципа адиабатической недостижимости Каратеодори: вблизи каждого равновесного состояния термодинамической системы есть другие равновесные состояния, недостижимые из первого адиабатическим путем, т. е. без теплообмена. Покажите эквивалентность этого принципа формулировке второго начала термодинамики, предложенной Томсоном.

Решение. Перейдем из некоторого равновесного состояния 1 в другое равновесное состояние 2, сообщив системе некоторое количество теплоты Q таким образом, чтобы система совершила при этом работу A . На основании первого начала термодинамики справедливо:

$$Q = E_2 - E_1 + A. \quad (1.32)$$

Обратный переход из состояния 2 в состояние 1 совершим адиабатическим путем; пусть при этом система совершает работу A' . В этом случае справедливо:

$$0 = E_1 - E_2 + A'. \quad (1.33)$$

В результате система вернулась в начальное состояние 1, в котором энергия системы имеет прежнее значение E_1 , что и до

описанных переходов. С помощью (1.32) и (1.33) находим:

$$Q = A + A'. \quad (1.34)$$

Этот процесс можно повторить многократно и тем самым реализовать периодически действующее устройство, которое всю полученную теплоту превращает в работу, не отдавая теплоты окружающим телам. Но это противоречит второму началу термодинамики в формулировке Томсона. Нетрудно видеть, что переход системы из одного состояния в другое, описываемый уравнением (1.32), всегда возможен. Значит, в общем случае невозможен переход, описываемый уравнением (1.33). Другими словами, состояние 1 адиабатически недостижимо из состояния 2 — и наоборот, в силу произвольности состояния 2 отсюда следует, что состояние 1 окружено адиабатически недостижимыми из него состояниями 2. Тем самым устанавливается обязательность теплообмена для произвольных макроскопических процессов.

4. Установите связь между изотермическим K_T и адиабатическим $K_{ад}$ модулями упругости:

$$K_T = -V \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T; \quad K_{ад} = -V \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{ад}.$$

Решение. Эту задачу можно решить, не используя второго начала термодинамики. Для этого нужно вывести уравнение адиабаты и вычислить производную $\left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{ад}$.

Записав первое начало термодинамики в виде

$$\delta Q = dU + p dV = \left[\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + p \right] dV + \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V dT$$

и учитывая, что

$$\left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = C_V, \quad \left[\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + p \right] = (C_p - C_V) \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_p,$$

получим, полагая $\delta Q = 0$, уравнение адиабаты в виде:

$$C_V dT + (C_p - C_V) \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_p dV = 0. \quad (1.35)$$

Поскольку для dT справедливо соотношение

$$dT = \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_p dV + \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_V dp,$$

то уравнение (1.35) можно переписать как

$$C_V \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_V dp + C_p \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_p dV = 0. \quad (1.36)$$

Входящие в уравнение адиабаты (1.36) дифференциалы dp и dV не независимы, а соответствуют производной $\left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{\text{ад}}$. Поэтому с помощью (1.36) имеем

$$\left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{\text{ад}} = -\frac{C_p}{C_V} \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_p \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V = \gamma \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T. \quad (1.37)$$

При получении (1.37) использовано тождество (1.9) и введено обозначение $\gamma = \frac{C_p}{C_V}$. Равенство (1.37) дает ответ на поставленный вопрос:

$$K_{\text{ад}} = \gamma K_T. \quad (1.38)$$

Используя второе начало термодинамики, соотношение (1.38) можно получить проще. Для этого достаточно учесть, что при адиабатическом обратимом процессе энтропия не изменяется, поэтому $K_{\text{ад}} = K_s = -V \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_s$.

Теперь с помощью методов якобианов имеем

$$\left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_s = \frac{\partial(p, S)}{\partial(V, S)} = \frac{\partial(p, S)}{\partial(p, T)} \frac{\partial(p, T)}{\partial(V, T)} \frac{\partial(V, T)}{\partial(V, S)} = \frac{C_p}{C_V} \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T, \quad (1.39)$$

поскольку $C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V$, $C_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p$.

Равенство (1.39) соответствует соотношению (1.38).

5. Выразить разность $C_p - C_V$ теплоемкостей при постоянном давлении и при постоянном объеме для системы с неизменным числом частиц через величины, определяемые уравнением состояния, не заданным в явном виде.

Решение. Используя первое начало термодинамики

$$\delta Q = dU + pdV, \quad (1.40)$$

имеем непосредственно

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V.$$

Считая в (1.40) внутреннюю энергию U функцией температуры и объема, можем записать

$$C_p = C_V + \left[\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + p \right] \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p. \quad (1.41)$$

Выражение в квадратных скобках в правой части (1.41) легко вычислить, воспользовавшись фундаментальным равенством Гиббса:

$$TdS = dU + pdV.$$

Имеем:

$$T \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T = \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + p.$$

Далее, из соотношения

$$dF = -SdT - pdV$$

следует равенство

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T = \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V.$$

Поэтому

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + p = T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V.$$

Теперь с помощью соотношения (1.41) получаем

$$C_p - C_V = T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P. \quad (1.42)$$

Используя соотношение (1.9), можно представить разность $C_p - C_V$ в виде

$$C_p - C_V = -T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P^2 \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T^{-1}, \quad (1.43)$$

или

$$C_p - C_V = -T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V^2 \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T^{-1}. \quad (1.44)$$

6. Выяснить, у каких систем теплоемкость при постоянном объеме C_V не зависит от объема системы.

Решение. Нас интересует случай, когда обращается в нуль производная $\left(\frac{\partial C_V}{\partial V} \right)_T$. Поскольку

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V,$$

то необходимо исследовать величину

$$\left(\frac{\partial C_V}{\partial V} \right)_T = \frac{\partial^2 U}{\partial V \partial T} = \frac{\partial^2 U}{\partial T \partial V}. \quad (1.45)$$

Так как

$$dU = TdS - pdV,$$

то

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = T \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T - p.$$

Но из $dF = -TdS - pdV$ следует

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V;$$

поэтому

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V - p. \quad (1.46)$$

Дифференцируя это равенство по температуре, с учетом (1.45) находим

$$\left(\frac{\partial C_V}{\partial V}\right)_T = T \left(\frac{\partial^2 p}{\partial T^2}\right)_V.$$

Итак, теплоемкость C_V не зависит от объема, если давление — линейная функция температуры. В этом случае

$$\left(\frac{\partial C_V}{\partial V}\right)_T \sim \frac{\partial^2 p}{\partial T^2} = 0.$$

7. Выяснить, у каких систем теплоемкость при постоянном давлении не зависит от давления.

Решение. Задача аналогична предыдущей. Учитывая, что

$$dW = TdS + Vdp, \quad (1.47)$$

имеем

$$C_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p = \left(\frac{\partial W}{\partial T}\right)_p.$$

Составляем производную

$$\left(\frac{\partial C_p}{\partial p}\right)_T = \frac{\partial^2 W}{\partial p \partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \frac{\partial W}{\partial p}.$$

Поскольку из (1.47) следует

$$\left(\frac{\partial W}{\partial p}\right)_T = V + T \left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T,$$

то с помощью соотношения

$$d\Phi = -SdT + Vdp$$

находим

$$\left(\frac{\partial W}{\partial p}\right)_T = V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p.$$

Теперь для $\left(\frac{\partial C_p}{\partial p}\right)$ получаем

$$\left(\frac{\partial C_p}{\partial p}\right) = \frac{\partial}{\partial T} \left[V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \right] = -T \left(\frac{\partial^2 V}{\partial T^2}\right)_p.$$

Видно, что C_p не зависит от p , если объем системы V — линейная функция температуры.

8. Используя факт существования уравнения состояния, определите зависимость теплоемкости C_V от давления и теплоемкости C_p от объема системы.

Решение. Задача сводится к вычислению производных $\left(\frac{\partial C_V}{\partial p}\right)_T$ и $\left(\frac{\partial C_p}{\partial V}\right)_T$. Используя метод якобианов, имеем:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial C_V}{\partial p}\right)_T &= \frac{\partial(C_V, T)}{\partial(p, T)} = \frac{\partial(C_V, T)}{\partial(V, T)} \frac{\partial(V, T)}{\partial(p, T)} = \\ &= \left(\frac{\partial C_V}{\partial V}\right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T = T \left(\frac{\partial^2 p}{\partial T^2}\right)_V \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T. \end{aligned}$$

При получении последнего равенства учтен результат, полученный в предыдущей задаче. Аналогично имеем:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial C_p}{\partial V}\right)_T &= \frac{\partial(C_p, T)}{\partial(V, T)} = \frac{\partial(C_p, T)}{\partial(p, T)} \frac{\partial(p, T)}{\partial(V, T)} = \\ &= \left(\frac{\partial C_p}{\partial p}\right)_T \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T = -T \left(\frac{\partial^2 V}{\partial T^2}\right)_p \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T. \end{aligned}$$

Отметим, что в устойчивом состоянии $\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T < 0$. Поэтому знак производной $\left(\frac{\partial C_V}{\partial p}\right)_T$ противоположен знаку производной $\left(\frac{\partial C_p}{\partial V}\right)_T$. Этот результат очевиден без специального рассмотрения, ибо в устойчивой равновесной системе увеличение объема при неизменной температуре сопровождается уменьшением давления и наоборот.

9. Покажите, что для идеального газа $C_p - C_V = R$, а внутренняя энергия зависит только от температуры, используя только уравнение состояния идеального газа $pV = RT$ и выражение для дифференциала свободной энергии

$$dF = -SdT - pdV. \quad (1.48)$$

Решение. Интегрируя выражение (1.48) при постоянной температуре, получим

$$F = F_0(T) - RT \ln V, \quad (1.49)$$

где $F_0(T)$ — некоторая функция температуры. Теперь можно найти выражение для энтропии газа:

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = S_0(T) + R \ln V, \quad (1.50)$$

где $S_0 = - \frac{\partial F_0(T)}{\partial T}$. Выражения для теплоемкостей C_V и C_p записываются с помощью (1.50) следующим образом:

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = T \frac{\partial S_0(T)}{\partial T},$$

$$C_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p = T \frac{\partial S_0(T)}{\partial T} + RT \left(\frac{\partial \ln V}{\partial T} \right)_p = C_V + R,$$

отсюда следует $C_p - C_V = R$.

Выражение для внутренней энергии U с помощью соотношений (1.49) и (1.50) записывается следующим образом:

$$U = F + TS = F_0(T) - RT \ln V + TS_0(T) + RT \ln V = \\ = F_0(T) + TS_0(T) = U(T).$$

Обратим внимание на то, что изложенный метод решения — интегрирование выражения (1.48) для dF при постоянной температуре — возможен только при явном задании уравнения состояния, причем в таком виде, когда можно практически выполнить интегрирование.

10. Используя уравнения состояния упругой пружины $f = kl$, где f — сила натяжения, а l — удлинение пружины от ненапряженного равновесного состояния, а также выражение для дифференциала свободной энергии

$$dF = -SdT + fdl, \quad (1.51)$$

найдите теплоёмкость C_l при постоянном удлинении l , теплоёмкость C_f при постоянном натяжении пружины и внутреннюю энергию системы.

Решение. Интегрируя выражение (1.51) при постоянной температуре от ненапряженного состояния пружины ($l = 0$) до некоторого значения l , найдем

$$F = F_0(T) + \frac{kl^2}{2}. \quad (1.52)$$

Действуя так же, как и в предыдущей задаче, получаем

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_l = S_0(T) - \frac{l^2}{2} \frac{dk}{dT}. \quad (1.53)$$

Последнее слагаемое в правой части (1.53) учитывает зависимость коэффициента жесткости k пружины от температуры. Производная от коэффициента жесткости пружины по температуре вычисляется в рамках линейного приближения, при котором k считается функцией температуры и не зависит от удлинения пружины. Для теплоемкостей C_l и C_f получаем

$$\begin{aligned} C_l &= T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_l = T \frac{\partial S_0(T)}{\partial T} - \frac{l^2 T}{2} \frac{d^2 k}{dT^2}, \\ C_f &= T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_f = T \frac{\partial S_0(T)}{\partial T} - \frac{l^2 T}{2} \frac{d^2 k}{dT^2} + \frac{l^2 T}{k} \left(\frac{dk}{dT} \right)^2 = \\ &= C_l + \frac{l^2 T}{k} \left(\frac{dk}{dT} \right)^2. \end{aligned} \quad (1.54)$$

При получении выражения для C_f учтено, что выражение (1.53) для энтропии можно записать в виде:

$$S = S_0(T) - \frac{f^2}{2k^2} \frac{dk}{dT}.$$

Из выражений (1.54) следует, что

$$C_f - C_l = \frac{l^2 T}{k} \left(\frac{dk}{dT} \right)^2 > 0.$$

Выражение для внутренней энергии может быть получено так же, как в предыдущей задаче. С помощью (1.52) и (1.53) имеем:

$$U = F + TS = U_0(T) + \frac{kl^2}{2} \left(1 - \frac{T}{k} \frac{dk}{dT} \right), \quad (1.55)$$

где

$$U_0(T) = F_0(T) + TS_0(T).$$

Выражение (1.55) показывает, что изменение внутренней энергии при изотермическом процессе не равно совершенной механической работе $\frac{kl^2}{2}$, а больше или меньше этой величины в зависимости от знака производной $\frac{dk}{dT}$. Тем самым равенство (1.55) указывает на обязательное присутствие процесса теплопередачи при изотермическом совершении работы. В случае теплоизолированной системы с $\frac{dk}{dT} \neq 0$ совершение механической работы обязательно сопровождается изменением температуры системы.

11. Эмпирическое уравнение состояния резиновой ленты имеет вид:

$$f = aT \left(\frac{l}{l_0} - \left(\frac{l_0}{l} \right)^2 \right),$$

где l — длина ленты, l_0 — длина ленты в нерастянутом состоянии, f — сила натяжения ленты, a — некоторая положительная постоянная. От каких термодинамических переменных зависит внутренняя энергия ленты? Найти работу, совершенную при изотермическом растяжении ленты от длины l_1 до l_2 , и количество поглощенной ею при этом теплоты. Найти конечную температуру ленты при ее обратимом растяжении между значениями длины l_1 и l_2 , если начальная температура T_1 . Теплоемкость C_l ленты при постоянной длине считать постоянной.

Решение. Уравнение состояния ленты задано в явном виде, поэтому внутреннюю энергию можно найти с помощью метода, изложенного в двух предыдущих задачах. Интегрируем выражение

$$dF = -SdT + fdl \quad (1.56)$$

при постоянной температуре от значения l_0 до l , получим

$$F = F_0(T) + ab(l)T,$$

где $b(l) = \frac{l^2}{2l_0} + \frac{l_0^2}{l} - \frac{3}{2}l_0$.

Энтропия ленты S есть

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_l = S_0(T) - ab(l), \quad (1.57)$$

так что для ее внутренней энергии U получаем

$$U = F + TS = F_0(T) + TS_0(T) = U_0(T).$$

Внутренняя энергия ленты зависит только от температуры и не зависит от ее длины. Разумеется, этот результат можно было получить и с помощью уравнения

$$\left(\frac{\partial U}{\partial l} \right)_T = -T \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_l + f = 0,$$

которое можно вывести с помощью соотношения (1.56). Для теплоемкости ленты C_l с помощью (1.57) имеем:

$$C_l = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_l = T \frac{\partial S_0(T)}{\partial T}.$$

Видно, что C_l может зависеть от температуры, но по условию задачи она считается постоянной.

Работа, совершаемая при изотермическом растяжении ленты, легко вычисляется с помощью уравнения состояния и оказывается положительной, как это и следует из элементарных соображений:

$$A = \int_{l_1}^{l_2} f dl = aT \int_{l_1}^{l_2} \left(\frac{l}{l_0} - \left(\frac{l_0}{l} \right)^2 \right) dl = aT \frac{l_2 - l_1}{l_0} \left(\frac{l_1 + l_2}{2} - \frac{l_0^3}{l_1 l_2} \right).$$

При изотермическом процессе внутренняя энергия ленты с заданным уравнением состояния не изменится. Поэтому $Q = -A$: лента не поглощает, а отдает тепло, величина которого равна совершенной работе при ее растяжении.

При обратимом растяжении ленты ее энтропия остается постоянной, поэтому на основании фундаментального равенства Гиббса

$$dU = TdS + fdl$$

имеем

$$C_l dT = fdl.$$

Используя уравнение состояния ленты, получаем

$$C_l \frac{dT}{T} = a \left(\frac{l}{l_0} - \frac{l_0^2}{l^2} \right) dl,$$

что после интегрирования дает:

$$C_l \ln \frac{T_2}{T_1} = a \frac{l_2 - l_1}{l_0} \left(\frac{l_1 + l_2}{2} - \frac{l_0^3}{l_1 l_2} \right).$$

Отсюда находим значение T_2 .

12. Найти уравнение состояния системы, для которой выполняются условия $\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T = 0$, $\left(\frac{\partial W}{\partial p} \right)_T = 0$.

Решение. Из уравнений, полученных в предыдущих задачах:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T = T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V - p, \quad \left(\frac{\partial W}{\partial p} \right)_T = V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p,$$

в рассматриваемом случае следуют равенства

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_V = \frac{T}{p}, \quad \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_p = \frac{T}{V}.$$

Отсюда получаем для дифференциала температуры

$$dT = \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_V dp + \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_p dV = \frac{T}{p} dp + \frac{T}{V} dV,$$

или

$$\frac{dT}{T} = \frac{dp}{p} + \frac{dV}{V}.$$

Интегрируя, находим

$$pV = CT,$$

где C — произвольная постоянная, которую нельзя определить термодинамически. Полученное соотношение соответствует уравнению состояния идеального газа.

13. Как изменится полученное в предыдущей задаче уравнение состояния идеального газа в случаях:

а) $\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = 0, \left(\frac{\partial W}{\partial p}\right)_T = b,$

б) $\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = a, \left(\frac{\partial W}{\partial p}\right)_T = 0,$

где a и b — некоторые постоянные?

Решение. Рассмотрим случай а). С помощью приведенных в предыдущей задаче соотношений имеем:

$$T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V - p = 0, \quad V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = b.$$

Из этих равенств следует, что

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_V = \frac{T}{p}, \quad \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_p = \frac{T}{V - b}.$$

Для дифференциала температуры теперь имеем:

$$\frac{dT}{T} = \frac{T}{p} dp + \frac{T}{V - b} dV.$$

Интегрируя это соотношение, находим

$$p(V - b) = CT,$$

где C — некоторая постоянная.

Полученное соотношение представляет собой «укороченное» уравнение Ван-дер-Ваальса, в котором учтена только поправка b , связанная с собственными размерами молекул, но не с их взаимодействием между собой. Таким образом, замена V на $V - b$ в уравнении состояния идеального газа соответствует постоянному ненулевому значению производной от энтальпии по давлению $\left(\frac{\partial W}{\partial p}\right)_T$.

Аналогичные преобразования в случае б) приводят к соотношению

$$(p - a)V = CT,$$

которое также похоже на некоторое «укороченное» уравнение Ван-дер-Ваальса, в котором учтена только поправка, связанная с взаимодействием молекул друг с другом. В действительности эта поправка в уравнении Ван-дер-Ваальса зависит от объёма и имеет вид $\frac{a}{V^2}$. Чему при этом равна производная $\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T$? Это можно выяснить с помощью уравнения

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V - p.$$

Вычисляя производную $\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V$ с помощью уравнения Ван-дер-Ваальса

$$p = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2}$$

и подставляя ее в приведенное выше уравнение, получим

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = \frac{a}{V^2}.$$

С помощью уравнения

$$\left(\frac{\partial W}{\partial p}\right)_T = V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$$

легко убедиться, что в этом случае производная $\left(\frac{\partial W}{\partial p}\right)_T$ не равна константе.

14. Вычислить значение выражения

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_V \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_p - \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_p \left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_V.$$

Решение. Легко заметить, что приведенное в условии задачи выражение можно записать в виде определителя

$$\frac{\partial(T, S)}{\partial(p, V)}.$$

Теперь, пользуясь указанным свойством якобианов (1.8), имеем

$$\frac{\partial(T, S)}{\partial(p, V)} = \frac{\partial(T, S)}{\partial(p, T)} \frac{\partial(p, T)}{\partial(p, V)} = - \left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p^{-1}.$$

Но из $d\Phi = -SdT + Vdp$ следует равенство

$$\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = - \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p.$$

Поэтому исходное выражение равно единице.

15. Выяснить, как меняется энтропия однородной системы при ее квазистатическом расширении при постоянном давлении. Зависит ли характер изменения энтропии от коэффициента теплового расширения $\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p$?

Решение. Нас интересует знак производной $\left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_p$. Выразим эту величину через коэффициент теплового расширения α . Имеем с помощью метода якобианов

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_p = \frac{\partial(S, p)}{\partial(V, p)} = \frac{\partial(S, p)}{\partial(T, p)} \frac{\partial(T, p)}{\partial(V, p)} = \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_p = \frac{C_p}{TV\alpha}, \quad (1.58)$$

так как

$$C_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p.$$

Использованное в (1.58) преобразование очевидно, поскольку справа мы хотим получить производную $\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p$.

Теплоемкость при постоянном давлении неотрицательна, поэтому знак левой части (1.58) определяется знаком α . Энтропия возрастает, если α положительно, и убывает, если α отрицательно. Например, при изобарическом расширении воды от 0 до 4°C энтропия убывает.

16. Доказать тождество

$$\left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_S = \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T + \frac{T}{C_p} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p^2.$$

Решение. *Способ I.* Подобные равенства удобно доказывать, рассматривая стоящую слева функцию $V(p, S)$ как сложную функцию переменных p и S , от которых зависят переменные V и T , фигурирующие в правой части тождества

$$V(p, S) = V(p, T(S, p)).$$

Теперь, пользуясь правилами дифференцирования сложных функций, получим

$$\left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_S = \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T + \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_S. \quad (1.59)$$

Раскрывая производную:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_S = \frac{\partial(T, S)}{\partial(p, S)} = \frac{\partial(T, S)}{\partial(p, T)} \frac{\partial(p, T)}{\partial(p, S)} = - \left(\frac{\partial S}{\partial p} \right)_T \left(\frac{\partial T}{\partial S} \right)_p$$

с учетом выражений $C_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p$ и $d\Phi = -SdT + Vdp$ для $\left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_S$ находим

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_S = \frac{T}{C_p} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p.$$

Подставляя это выражение в (1.59), получаем требуемое равенство.

Способ II. Задачу можно решить непосредственно, записывая левую часть с помощью якобиана

$$\left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_S = \frac{\partial(V, S)}{\partial(p, S)}.$$

Теперь, учитывая, что в правой части интересующего нас тождества фигурируют переменные p и T , имеем

$$\left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_S = \frac{\partial(V, S)}{\partial(p, T)} \frac{\partial(p, T)}{\partial(p, S)} = \frac{T}{C_p} \frac{\partial(V, S)}{\partial(p, T)}.$$

Записывая определитель в явном виде, получаем

$$\left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_S = \frac{T}{C_p} \left[\left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p - \left(\frac{\partial S}{\partial p} \right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \right].$$

Раскрывая квадратные скобки и учитывая приведенные выражения для C_p и $d\Phi$, получаем требуемое равенство.

17. Доказать тождество

$$\left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_S = \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T - \frac{T}{C_V} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V^2.$$

Решение. Задача аналогична предыдущей. Используя, например, способ II, имеем

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_S &= \frac{\partial(p, S)}{\partial(V, S)} = \frac{\partial(p, S)}{\partial(V, T)} \frac{\partial(V, T)}{\partial(V, S)} = \frac{T}{C_V} \frac{\partial(p, S)}{\partial(V, T)} = \\ &= \frac{T}{C_V} \left[\left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V - \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T \right]. \end{aligned}$$

Учитывая соотношение $dF = -SdT - pdV$, приходим к интересующему нас равенству.

18. Считая, что основной причиной изменения температуры T воздуха с высотой h в нижней части земной атмосферы являются конвекционные потоки, определите градиент температуры $\frac{dT}{dh}$, считая воздух идеальным газом, а все процессы —

расширение воздуха при его подъеме и сжатие при опускании — адиабатическими вследствие низкой теплопроводности воздуха.

Решение. Рассмотрим горизонтальный слой воздуха толщиной dh , расположенный на высоте h над уровнем моря. Для изменения давления dp воздуха при переходе от нижней до верхней поверхности слоя имеем

$$dp = -\rho g dh, \quad (1.60)$$

где ρ — плотность воздуха, для которой в принятом приближении с помощью уравнения Менделеева—Клапейрона имеем:

$$\rho = \frac{\mu p}{RT}.$$

Здесь μ — средняя молярная масса воздуха. Теперь соотношение (1.60) записывается так:

$$dp = -\frac{\mu p}{RT} g dh. \quad (1.61)$$

Уравнения (1.60) и (1.61), выражающие условия механического равновесия выделенного слоя воздуха, справедливы при любых происходящих в воздухе процессах, которые не приводят к существенному нарушению механического равновесия. Например, это могут быть процессы теплопередачи в неподвижном воздухе. Однако в условии задачи указано, что основным процессом является конвективное вертикальное движение воздуха без теплообмена с окружением. Будем поэтому считать, что происходящие в атмосферном воздухе процессы соответствуют самому началу конвективного режима, при котором еще приблизительно выполняются условия механического равновесия произвольных слоев воздуха.

Используя уравнение адиабаты для идеального газа в переменных p и T

$$Tp^{\frac{1}{\gamma}-1} = \text{const}, \quad \gamma = \frac{C_p}{C_v},$$

получаем соотношение

$$\frac{dT}{T} = \left(1 - \frac{1}{\gamma}\right) \frac{dp}{p}. \quad (1.62)$$

Сравнивая (1.61) и (1.62), находим:

$$\frac{dT}{dh} = \left(\frac{1}{\gamma} - 1\right) \frac{g\mu}{R}. \quad (1.63)$$

Полагая $\gamma = 7/5$, $\mu = 28,9$ г/моль, находим

$$\frac{dT}{dh} = -9,8 \text{ К/км.}$$

Это значение по модулю несколько больше, чем наблюдаемое на опыте среднее снижение температуры с высотой. Разница объясняется (в основном) эффектом конденсации водяного пара в расширяющемся при подъеме воздухе.

19. Выясните законность сделанного при решении предыдущей задачи предположения о возможности использования условия механического равновесия при рассмотрении конвекции воздуха в земной атмосфере в адиабатических условиях.

Решение. Сделанное в решении предыдущей задачи предположение о том, что адиабатические процессы в воздухе соответствуют самому началу конвективного режима, справедливо если «элемент» воздуха, поднявшись адиабатически (т. е. при неизменной энтропии) на некоторую высоту Δz , окажется там тяжелее, чем «вытесненный» им при переходе в новое положение воздух. Таким образом, использование условия механического равновесия можно считать оправданным, если выполняется равенство:

$$\rho(p', s) - \rho(p', s') > 0, \quad (1.64)$$

где p и s давление воздуха и энтропия единицы объема на высоте z , p' и s' — значения этих величин на высоте $z' = z + \Delta z$. Раскладывая $s'(z')$ в ряд Тейлора и ограничиваясь линейными членами разложения

$$s'(z') = s'(z + \Delta z) = s(z) + \frac{ds}{dz} \Delta z,$$

а затем подставляя $s'(z')$ в (1.64), получаем условие

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial s}\right)_p \cdot \frac{ds}{dz} < 0. \quad (1.65)$$

Входящую в эту формулу производную $\left(\frac{\partial \rho}{\partial s}\right)_p$ получаем по методу якобианов:

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial s}\right)_p = \frac{\partial(\rho, p)}{\partial(s, p)} = \frac{\partial(\rho, p)}{\partial(T, p)} \frac{\partial(T, p)}{\partial(s, p)} = \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_p \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial s}\right)_p = \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_p \frac{T}{C_p},$$

где $C_p = T \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p$ — теплоемкость единицы объема воздуха при постоянном давлении. Так как для воздуха $\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_p < 0$, то из

(1.65) следует, что искомое условие устойчивости слоя воздуха принимает вид

$$\frac{ds}{dz} > 0. \quad (1.66)$$

Рассматривая энтропию s как функцию температуры и давления, имеем с помощью (1.66)

$$\frac{ds}{dz} = \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p \frac{dT}{dz} + \left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T \frac{dp}{dz} > 0. \quad (1.67)$$

С помощью последнего из равенств (1.4) получим:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p,$$

откуда следует, что производная $\left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T$ равна взятому с обратным знаком коэффициенту теплового расширения воздуха $\beta = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$:

$$\left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T = -\beta.$$

Далее,

$$\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_T = \frac{c_p}{T},$$

а для $\frac{dp}{dz}$ можно воспользоваться выражением (1.60) из предыдущей задачи. Теперь условие (1.67) принимает вид

$$\frac{c_p}{T} \frac{dT}{dz} - \beta \rho g > 0,$$

откуда

$$\frac{dT}{dz} > \frac{\rho g \beta T}{c_p}. \quad (1.68)$$

Для идеального газа, как легко убедиться, справедливо равенство $\beta T = -1$, и условие (1.68) переписывается следующим образом:

$$\frac{dT}{dz} > -\frac{\rho g}{c_p}. \quad (1.69)$$

Правая часть (1.69) совпадает с правой частью равенства (1.63) в решении предыдущей задачи:

$$\left(\frac{1}{\gamma} - 1\right) \frac{g\mu}{R} = -\frac{\rho g}{c_p},$$

поскольку $C_p = c_p \frac{\mu}{\rho}$.

Таким образом, используемое в предыдущей задаче выражение для градиента температуры соответствует предельному значению, при котором возможно возникновение режима конвекции в атмосфере.

20. Термодинамическая система расширяется таким образом, что ее энергия V остается постоянной. Как изменяется при этом температура системы? Будет ли такой процесс обратимым?

Решение. Необходимо определить, от чего зависит значение производной $\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_U$. Для этого удобно перейти к естественным переменным функции $U - V$ и S , поскольку при этом возникают непосредственно измеримые на опыте термодинамические параметры:

$$dU = TdS - pdV. \quad (1.70)$$

Поэтому преобразуем $\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_U$ следующим образом:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_U = \frac{\partial(T, U)}{\partial(V, U)} = \frac{\partial(T, U)}{\partial(V, S)} \frac{\partial(V, S)}{\partial(V, U)} = \frac{1}{T} \frac{\partial(T, U)}{\partial(V, S)}.$$

Раскрывая определитель, находим

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_U &= \frac{1}{T} \left[\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_V - \left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_V \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_S \right] = \\ &= \frac{1}{T} \left[T \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S + p \frac{T}{C_V} \right] = \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S + \frac{p}{C_V}. \end{aligned} \quad (1.71)$$

Остается вычислить производную $\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S$. Учитывая соотношение (1.70), переходим к переменным T, V , чтобы выделить в явном виде теплоемкость C_V :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S &= - \left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_V = - \frac{\partial(p, V)}{\partial(S, V)} = \\ &= - \frac{\partial(p, V)}{\partial(T, V)} \frac{\partial(T, V)}{\partial(S, V)} = - \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \frac{T}{C_V}. \end{aligned} \quad (1.72)$$

Теперь формула (1.71) принимает вид

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_U = \frac{1}{C_V} \left[p - T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \right]. \quad (1.73)$$

Искомая производная выражена через теплоемкость системы при постоянном объеме C_V , давление p , температуру T и изохорический температурный коэффициент давления $\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V$. Знак

изменения температуры определяется соотношением между слагаемыми в квадратных скобках в формуле (1.73).

Чтобы выяснить, будет ли описанный процесс обратимым, необходимо рассмотреть производную $\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_U$. Из соотношения (1.70) при $dU = 0$ имеем

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_U = \frac{p}{T} > 0.$$

Итак, происходящий с системой процесс всегда необратим независимо от того, как конкретно он реализуется: система расширяется в пустоту, не совершая работы и не получая или не отдавая теплоты, или система совершает работу при расширении, но к ней подводится теплота для обеспечения постоянства ее энергии.

Аналогично можно исследовать вопрос, как будет изменяться давление в системе. Для этого достаточно рассмотреть производную $\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_U$. Опять переходя к естественным переменным функции U , имеем

$$\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_U = \frac{\partial(p, U)}{\partial(V, S)} \frac{\partial(V, S)}{\partial(V, U)} = \frac{1}{T} \left[\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_S T + \left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_V p \right]. \quad (1.74)$$

Входящую сюда производную $\left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_V$ заменяем в соответствии с формулой (1.72), а производную $\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_S$ вычисляем, выделяя в явном виде теплоемкость C_V :

$$\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_S = \frac{\partial(p, S)}{\partial(p, T)} \frac{\partial(p, T)}{\partial(V, T)} \frac{\partial(V, T)}{\partial(V, S)} = \frac{C_p}{C_V} \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T.$$

Теперь выражение (1.74) переписывается следующим образом:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_U = \frac{1}{C_V} \left[C_p \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T + \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V p \right]. \quad (1.75)$$

Используя тождество

$$\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_V = -1,$$

можно придать формуле (1.75) более удобный вид, вводя изотермический модуль упругости $K_T = -V \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T > 0$:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_U = \frac{K_T}{VC_V} \left[p \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p - C_p \right]. \quad (1.76)$$

Видно, что характер изменения давления определяется соотношением между слагаемыми в квадратных скобках.

Замечание. Обратим внимание на то, что у идеального газа $pV = RT$ температура при рассмотренном процессе не меняется, а давление падает, в чем легко убедиться прямым вычислением по формулам (1.73) и (1.76).

21. Используя уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (1.77)$$

и уравнение движения идеальной жидкости

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = -\nabla p, \quad (1.78)$$

выразить в линейном по возмущениям приближении скорость звука в такой системе через изотермический модуль всестороннего сжатия $K_T = \rho \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T$.

Решение. Использование линейного по возмущениям приближения означает, что во всех выражениях следует пренебречь членами, содержащими квадраты и более высокие степени переменных величин $\delta \rho$ и δp . Сюда же следует отнести и скорость движения жидкости v , ибо в термодинамическом равновесии $v = 0$. Поэтому уравнения (1.77) и (1.78) следует переписать в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta \rho + \operatorname{div} \rho_0 \mathbf{v} = 0, \quad (1.79)$$

$$\rho_0 \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla \delta p, \quad (1.80)$$

где ρ_0 — равновесная плотность жидкости. Дифференцируя уравнение (1.79) по времени и беря дивергенцию от уравнения (1.80), приходим к равенству

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta \rho - \nabla^2 \delta p = 0. \quad (1.81)$$

Теперь необходимо связать между собой величины $\delta \rho$ и δp . При распространении низкочастотного звука система находится в состоянии локального термодинамического равновесия, поэтому, выбирая в качестве независимых переменных ρ и S , имеем

$$\delta p = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_S \delta \rho + \left(\frac{\partial p}{\partial S} \right)_\rho \delta S. \quad (1.82)$$

В идеальной жидкости диссипация отсутствует, поэтому все происходящие процессы являются обратимыми. Это означает, что

энтропия системы не меняется, т. е. $\delta S = 0$. Поэтому соотношение (1.79) принимает вид

$$\delta p = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_S \delta \rho. \quad (1.83)$$

Подставляя (1.83) в (1.81), приходим к волновому уравнению

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta \rho - \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_S \nabla^2 \delta \rho = 0, \quad (1.84)$$

в котором производная $\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_S$ равна квадрату скорости u^2 распространения возмущений продольного звука. Теперь остается преобразовать адиабатическую производную $\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_S$ в изотермическую производную $\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T$. Используя метод якобианов, имеем

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_S = \frac{\partial(p, S)}{\partial(\rho, S)} = \frac{\partial(p, S)}{\partial(p, T)} \frac{\partial(p, T)}{\partial(\rho, T)} \frac{\partial(\rho, T)}{\partial(\rho, S)}.$$

Учитывая, что

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p = \frac{C_p}{T}, \quad \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_\rho = \frac{C_V}{T},$$

окончательно получаем

$$u^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_S = \frac{C_p}{C_V} \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T = \frac{C_p}{C_V} \frac{K_T}{\rho}.$$

22. Связать изменение температуры при изменении плотности жидкости в звуковой волне со скоростью распространения звука.

Решение. Изменение температуры приводит к необратимому характеру процессов, протекающих в звуковой волне, поскольку в системе возникает тепловой поток. Однако скорость передачи теплоты в реальной системе много меньше скорости распространения звука, поэтому в первом приближении можно считать, что процессы происходят обратимо, т. е. $dS = 0$.

Итак, искомая величина — это производная $\left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_S$. Преобразуя ее с помощью метода якобианов, сразу выделим квадрат скорости звука $u^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_S$:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_S = \frac{\partial(T, S)}{\partial(\rho, S)} = \frac{\partial(T, S)}{\partial(p, S)} \frac{\partial(p, S)}{\partial(\rho, S)} = \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_S u^2.$$

С помощью соотношения

$$dW = TdS + Vdp$$

находим

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_S = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_p.$$

Поэтому для искомой производной имеем

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_S = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_p u^2. \quad (1.85)$$

Производную $\left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_p$ преобразуем, выделяя в явном виде изобарический коэффициент теплового расширения $\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$.

Имеем

$$\left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_p = \frac{\partial(V, p)}{\partial(S, p)} = \frac{\partial(V, p)}{\partial(T, p)} \frac{\partial(T, p)}{\partial(S, p)} = \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_p = \alpha V \frac{T}{C_p}.$$

В результате выражение (1.85) для производной $\left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_S$ принимает вид

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_S = \frac{\alpha VT}{C_p} u^2.$$

Отношение теплоемкости системы при постоянном давлении C_p к ее объему V есть теплоемкость единицы объема c_p . Поэтому окончательно результат можно записать следующим образом:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_S = \frac{\alpha T u^2}{c_p}.$$

23. Для единицы объема диэлектрика с постоянной плотностью найти разность $c_E - c_D$ между теплоемкостями однородного изотропного диэлектрика при постоянной напряженности электрического поля \mathbf{E} и индукции \mathbf{D} .

Решение. Задачу удобно решать, используя определение теплоемкости через энтропию. В рассматриваемом случае имеем

$$c_E = T \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_E, \quad c_D = T \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_D.$$

Преобразуем выражение для c_E с помощью метода якобианов:

$$c_E = T \frac{\partial(s, T)}{\partial(T, E)} = T \frac{\partial(s, E)}{\partial(T, D)} \frac{\partial(T, D)}{\partial(T, E)}. \quad (1.86)$$

Раскрывая первый якобиан в правой части (1.86) и учитывая, что в изотропном диэлектрике $D = \varepsilon E$, имеем

$$c_E = T\varepsilon \left[\left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_D \frac{1}{\varepsilon} - \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_D \left(\frac{\partial s}{\partial D} \right)_T \right]. \quad (1.87)$$

Используя выражение для дифференциала свободной энергии единицы объема

$$df = -sdT + \frac{1}{4\pi} \mathbf{E}d\mathbf{D},$$

убеждаемся в справедливости соотношения

$$\left(\frac{\partial s}{\partial D} \right)_T = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_D. \quad (1.88)$$

Подставляя равенство (1.88) в выражение (1.87), получаем

$$c_E = c_D + \frac{T\varepsilon}{4\pi} \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_D^2. \quad (1.89)$$

Теперь осталось вычислить производную

$$\left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_D = \left(\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{D}{\varepsilon} \right) \right)_D = -\frac{D}{\varepsilon^2} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right)_D.$$

Подставляя это соотношение в (1.89), находим окончательно

$$c_E - c_D = \frac{TE^2}{4\pi\varepsilon} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right)_D^2.$$

Поскольку $\varepsilon > 0$, то правая часть этого выражения всегда положительна при $T > 0$. Поэтому $c_E > c_D$.

24. Для единицы объема магнетика с постоянной плотностью найти разность $c_H - c_M$ теплоемкостями однородного изотропного магнетика при постоянной напряженности магнитного поля \mathbf{H} и магнитного момента \mathbf{M} .

Решение. Задача решается аналогично предыдущей. Используя соотношения

$$c_H = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_H, \quad c_M = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_M,$$

преобразуем выражение для c_H :

$$c_H = T \frac{\partial(s, H)}{\partial(T, H)} = T \frac{\partial(s, H)}{\partial(T, M)} \frac{\partial(T, M)}{\partial(T, H)} = T \chi \frac{\partial(s, H)}{\partial(T, M)},$$

поскольку магнитный момент M связан с напряженностью поля H соотношением $M = \chi H$. Раскрывая определитель, получаем

$$c_H = T\chi \left[\left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_M \frac{1}{\chi} - \left(\frac{\partial s}{\partial M} \right)_T \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_M \right] = \\ = c_M - T\chi \left(\frac{\partial s}{\partial M} \right)_T \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_M. \quad (1.90)$$

Производную $\left(\frac{\partial s}{\partial M} \right)_T$ вычисляем с помощью соотношения, справедливого для изотропных магнетиков:

$$df_2 = -sdT \pm HdM.$$

Знак плюс относится к пара- и ферромагнетикам, где $\mathbf{M} \parallel \mathbf{H}$; знак минус — к диамагнетикам, где \mathbf{M} и \mathbf{H} направлены в противоположные стороны. Отсюда имеем

$$\left(\frac{\partial s}{\partial M} \right)_T = \mp \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_M.$$

Подставляя это соотношение в (1.90), получаем

$$c_H = c_M \pm T\chi \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_M^2.$$

Поскольку для пара- и ферромагнетиков $\chi > 0$, а для диамагнетиков $\chi < 0$, то c_H во всех случаях больше c_M .

25. Найти выражение для плотности внутренней энергии u однородного изотропного диэлектрика.

Решение. В рассматриваемом случае $D = \varepsilon E$ и выражение (1.11) записывается в виде

$$du = Tds + \zeta d\rho + \frac{1}{4\pi\varepsilon} DdD.$$

Интегрировать непосредственно это равенство нельзя: диэлектрическая проницаемость ε не остается неизменной при фиксированных ρ и s , поскольку в ходе такого процесса изменяется температура системы. Но в общем случае $\varepsilon = \varepsilon(T)$. Поэтому исходить следует из выражения для дифференциала плотности свободной энергии f :

$$df = -sdT + \zeta d\rho + \frac{1}{4\pi\varepsilon} DdD. \quad (1.91)$$

Интегрируя выражение (1.91) при постоянных T и ρ (диэлектрическая проницаемость ε в линейной электродинамике при этом остается постоянной), находим

$$f = f_0(T, \rho) + \frac{1}{8\pi\varepsilon} D^2, \quad (1.92)$$

где $f_0(T, \rho)$ — плотность свободной энергии в отсутствие электрического поля. Учитывая, что $s = -\left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_{\rho, D}$, с помощью (1.92) получаем

$$s = -\left(\frac{\partial f_0(T, \rho)}{\partial T}\right)_{\rho} + \frac{D^2}{8\pi\varepsilon^2} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right)_{\mathbf{D}, \rho} = s_0(T, \rho) + \frac{D^2}{8\pi\varepsilon^2} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right)_{\rho, D}. \quad (1.93)$$

Здесь $s_0(T, \rho)$ — плотность энтропии в отсутствие электрического поля. Теперь можно воспользоваться соотношением $u = f + Ts$. Учитывая, что $f_0 + Ts_0$ есть плотность внутренней энергии системы u_0 в отсутствие электрического поля, получаем

$$u = u_0(T, \rho) + \frac{D^2}{8\pi\varepsilon^2} \left[1 + \frac{T}{\varepsilon} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right)_{\rho, D} \right].$$

Второе слагаемое в квадратных скобках дает существенный вклад в плотность энергии при сильной зависимости диэлектрической проницаемости от температуры.

26. Конденсатор, заполненный диэлектриком с проницаемостью ε , подсоединен к источнику питания с постоянной ЭДС. Как изменится теплоемкость единицы объема диэлектрика после отсоединения конденсатора от источника питания? Выразить начальную и конечную теплоемкости через диэлектрическую проницаемость. Изменением объема диэлектрика пренебречь.

Решение. При замкнутой цепи напряжение на конденсаторе неизменно и равно ЭДС источника. Следовательно, остается неизменной напряженность электрического поля между его обкладками. Поэтому в первом случае теплоемкость системы есть c_E . При разомкнутой цепи неизменным остается электрический заряд на обкладках конденсатора. Это соответствует неизменной индукции электрического поля. Итак, изменение теплоемкости системы равно разности $c_D - c_E$, значение которой получено в задаче 23. Ответ можно получить иначе, используя формулу

(1.93) и определение теплоемкости $C_\gamma = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_\gamma$. Имеем

$$C_D = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right) = C_0(T) + \frac{D^2 T}{8\pi\epsilon^2} \left(\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial T^2} \right)_{\mathbf{D}, \rho} - \frac{D^2 T}{8\pi\epsilon^3} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial T} \right)_{\mathbf{D}, \rho}^2,$$

где $C_0(T)$ — теплоемкость незаряженного конденсатора. При вычислении теплоемкости C_E следует учесть равенство $D^2 = \epsilon^2 E^2$. Поэтому

$$C_E = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_{\mathbf{E}, \rho} = C_0(T) + \frac{T D^2}{8\pi\epsilon^2} \left(\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial T} \right)_{\mathbf{D}, \rho} \right)_{\mathbf{E}, \rho}.$$

Не представляет труда убедиться в том, что вторые слагаемые в правых частях этих равенств одинаковы. Действительно, в рамках линейной электродинамики диэлектрическая проницаемость среды определяется ее равновесными свойствами в отсутствие электрического поля. Поэтому производные от диэлектрической проницаемости по температуре при постоянной индукции поля и при постоянной напряженности поля одинаковы и совпадают с производной по температуре в отсутствие поля. Составляя разность полученных выражений для c_D и c_E и учитывая приведенное утверждение, находим

$$c_D - c_E = -\frac{T D^2}{4\pi\epsilon^3} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial T} \right)_{\mathbf{D}, \rho}^2.$$

27. Изменение внутренней энергии обратимого гальванического элемента в результате прохождения через него заряда e при изотермическом процессе дается выражением

$$U(T, e) = U(T) - ew(T),$$

где $w(T)$ — уменьшение энергии элемента при прохождении через него единичного заряда. Найти уравнение, связывающее электродвижущую силу источника E и энергию w .

Решение. Работа dR , совершаемая элементом при прохождении через него заряда de , равна

$$dR = \epsilon de, \quad (1.94)$$

если пренебрегается изменением объема элемента.

При малых токах джоулево тепло, пропорциональное квадрату силы тока, есть величина второго порядка малости. Поэтому процесс протекания тока в элементе можно считать термодинамически обратимым, если, конечно, изменение направления протекающего через элемент тока вызывает химические реакции,

противоположные тем, которые происходят в элементе при нормальном направлении тока. Тогда при учете соотношения (1.94) фундаментальное равенство Гиббса можно записать в виде

$$dU = TdS - Ede. \quad (1.95)$$

Вычисляя производную $\left(\frac{\partial U}{\partial e}\right)_T$ с помощью заданного в условии задачи соотношения и с помощью (1.95), приходим к равенству

$$-w = T\left(\frac{\partial S}{\partial e}\right)_T - E. \quad (1.96)$$

Входящую в (1.96) производную $\left(\frac{\partial S}{\partial e}\right)_T$ можно выразить с помощью формулы для дифференциала свободной энергии Гельмгольца F :

$$dF = -SdT - Ede. \quad (1.97)$$

Действительно, из (1.97) следует равенство

$$\left(\frac{\partial S}{\partial e}\right)_T = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_e. \quad (1.98)$$

Подставляя $\left(\frac{\partial S}{\partial e}\right)_T$ из (1.98) в равенство (1.96), приходим к уравнению, которое называется уравнением Гельмгольца:

$$E - T\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_e = w. \quad (1.99)$$

Отметим, что в отсутствие теплообмена между гальваническим элементом и окружающей средой естественно было бы ожидать, что $E = w$. Однако слагаемое $T\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_e$ в (1.99) описывает эффект, связанный с поглощением (или выделением) теплоты элементом из окружающей среды во время протекания электрического тока. Если, например, ЭДС элемента с повышением температуры увеличивается $\left(\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_e > 0\right)$, то, согласно (1.99), гальванический элемент совершает работу не только за счет уменьшения внутренней энергии при химической реакции, но и за счет теплоты, получаемой из окружающей среды. Работая адиабатически, такой элемент будет охлаждаться.

28. Диэлектрик с проницаемостью ε заполняет пространство между пластинами плоского конденсатора. Определите количество теплоты, выделяющейся в конденсаторе при квазистатическом возрастании напряжения на конденсаторе от 0 до U .

Решение. Используя полученное в задаче 25 выражение для плотности энтропии диэлектрика, можем записать выражение для энтропии диэлектрика, находящегося между обкладками конденсатора:

$$S(U, T) = S(0, T) + \frac{E^2}{8\pi} V \frac{d\varepsilon}{dT}, \quad (1.100)$$

где V — объем пространства между пластинами. Поскольку $\delta Q = T dS$, то, считая температуру при квазистатическом возрастании напряжения на конденсаторе постоянной, получим для количества теплоты:

$$Q = T \int_0^U dS = T \left\{ S\left(\frac{U}{d}, T\right) - S(0, T) \right\} = VT \frac{U^2}{8\pi d^2} \frac{d\varepsilon}{dT},$$

где d — расстояние между пластинами конденсатора. Эту формулу можно переписать в другом виде. В гауссовой системе единиц:

$$Q = \frac{1}{2} CU^2 \frac{d \ln \varepsilon}{d \ln T},$$

где C — емкость конденсатора. Величина $\frac{CU^2}{2}$ представляет собой работу, совершенную при зарядке конденсатора.

29. Найдите связь между изотермической и адиабатической восприимчивостями $\chi = \frac{\partial M}{\partial H}$ магнетика.

Решение. С помощью метода якобианов имеем

$$\left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_S = \frac{\partial(M, S)}{\partial(H, S)} = \frac{\partial(M, S)}{\partial(M, T)} \frac{\partial(M, T)}{\partial(H, T)} \frac{\partial(H, T)}{\partial(H, S)} = \frac{C_M}{C_H} \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T, \quad (1.101)$$

где C_M и C_H — теплоемкости при постоянном магнитном моменте и постоянной напряженности магнитного поля соответственно. Соотношение (1.101) означает, что

$$\chi_{\text{ад}} = \frac{C_M}{C_H} \chi_T.$$

30. Один из способов получения предельно низких температур заключается в использовании адиабатического размагничивания парамагнитных кристаллов. Определите количественную

характеристику этого эффекта $\left(\frac{\partial T}{\partial H}\right)_S$ для парамагнетика, подчиняющегося закону Кюри

$$M = \frac{aH}{T},$$

где a — константа Кюри.

Решение. Запишем выражение для дифференциала энтальпии W магнетика, помещенного в магнитное поле напряженности H :

$$dW = TdS + VdpMdH.$$

Отсюда имеем

$$\left(\frac{\partial T}{\partial H}\right)_{p,S} = -\left(\frac{\partial M}{\partial S}\right)_{p,H}. \quad (1.102)$$

Преобразуя правую часть этого равенства по методу якобианов, получим:

$$\left(\frac{\partial M}{\partial S}\right)_{p,H} = \frac{\partial(M, H)}{\partial(S, H)} = \frac{\partial(M, H)}{\partial(T, H)} \frac{\partial(T, H)}{\partial(S, H)} = \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_{H,p} \frac{T}{C_{H,p}}, \quad (1.103)$$

поскольку все частные производные в этом равенстве выполняются при постоянном давлении p . Теперь равенство (1.102) принимает вид

$$\left(\frac{\partial T}{\partial H}\right)_{p,S} = -\frac{T}{C_{H,p}} \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_{H,p}. \quad (1.104)$$

Вычисляя производную $\left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_{p,H}$ для магнетика, подчиняющегося закону Кюри, найдем

$$\left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_{p,H} = -\frac{aH}{T^2}.$$

В результате равенство (1.104) окончательно переписывается следующим образом:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial H}\right)_{p,S} = \frac{aH}{C_{p,H}T}.$$

При размагничивании, когда напряженность магнитного поля уменьшается, температура убывает ($dT < 0$). При низких температурах теплоемкость $C_{p,H}$, согласно закону Дебая, пропорциональна кубу температуры, поэтому

$$\left(\frac{\partial T}{\partial H}\right)_{p,S} \sim \frac{1}{T^4}.$$

При низких температурах изменение температуры очень велико — обратно пропорционально четвертой степени температуры.

Задачи для самостоятельного решения

31. Вычислить скорость звука в идеальном газе и газе Ван-дер-Ваальса, исходя из его термодинамического определения $u = \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_S}$.

32. Газ продавливается через пористую перегородку таким образом, что давления по обе стороны перегородки постоянны и равны p_1 и p_2 соответственно (процесс Джоуля—Томсона). Показать, что для идеального газа температура в таком процессе не меняется.

Как будет меняться температура в газе Ван-дер-Ваальса?

33. Найти разность $C_p - C_V$ для газа Ван-дер-Ваальса.

РАВНОВЕСНАЯ СТАТИСТИКА КЛАССИЧЕСКИХ И КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

§ 2.1. Статистические ансамбли и статистические суммы

В равновесной статистической механике вычисляется статистическая сумма рассматриваемой системы в каком-либо ансамбле. Информация о свойствах системы извлекается из статистической суммы с помощью термодинамики. Наиболее широко используются два ансамбля — канонический и большой канонический.

В каноническом ансамбле статистическая сумма Q_N для квантовой системы из N частиц имеет вид

$$Q \equiv Q_N = \sum_n \exp(-\beta E_n), \quad (2.1)$$

где $\beta = 1/(kT)$ — параметр распределения Гиббса, E_n — энергия системы в квантовом состоянии, задаваемом набором квантовых чисел n .

Для классической системы из N тождественных частиц статистическая сумма Q_N дается выражением

$$Q_N = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N} N!} \int d\Gamma \exp(-\beta H(p, q)), \quad (2.2)$$

где $H(p, q)$ — функция Гамильтона системы, а интегрирование проводится по всему фазовому объему системы. Множитель $\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}}$ связан с соотношением неопределенности Гейзенберга и имеет смысл элементарного объема в фазовом пространстве, при перемещении внутри которого изображающей систему точки не появляется нового микроскопического состояния. Множитель $\frac{1}{N!}$ связан с квантовой неразличимостью тождественных частиц.

Он обеспечивает правильную зависимость термодинамических характеристик от числа частиц N в системе (см. задачу 1). Свободная энергия F связана со статистической суммой Q_N канонического ансамбля соотношением

$$F = -kT \ln Q. \quad (2.3)$$

В большом каноническом ансамбле статистическая сумма \mathcal{L} определяется выражением

$$\mathcal{L} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_n \exp[\beta(\mu N - E_{nN})], \quad (2.4)$$

где μ — химический потенциал, а E_{nN} — энергия системы из N частиц, находящейся в квантовом состоянии, задаваемом набором квантовых чисел n . Со статистической суммой \mathcal{L} связан термодинамический потенциал Ω :

$$\Omega = -kT \ln \mathcal{L}. \quad (2.5)$$

Статистические суммы в разных ансамблях связаны между собой преобразованием Лапласа—Меллина. Например, число состояний $N(E)$ с энергией E , меньшей или равной E , является статистической суммой макроканонического ансамбля и может быть представлено в виде

$$N(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(E') dE',$$

где $\rho(E)$ — плотность состояний, т. е. число состояний, приходящих на единичный интервал энергии. Если в (2.1) перейти от суммирования по квантовым числам n к интегрированию по энергии, то выражение (2.1) для статистической суммы с положительным энергетическим спектром ($E > 0$) запишется в виде

$$Q(\beta) = \int_0^{\infty} \rho(E) e^{-\beta E} dE. \quad (2.6)$$

Отсюда следует, что статистическая сумма канонического ансамбля является лапласовским образом плотности состояний. Теперь очевидно, что

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} Q(\beta) \exp(\beta E) d\beta. \quad (2.7)$$

Далее, формулу (2.4) можно записать в виде

$$\mathcal{L} = \sum_{N=0}^{\infty} \exp(\beta\mu N) Q_N. \quad (2.8)$$

Соотношение (2.8) можно рассматривать как дискретное преобразование Лапласа.

При решении задач следует избегать непосредственного вычисления искомой средней характеристики системы путем усреднения ее микроскопического аналога. Необходимо помнить, что вся информация о макроскопических свойствах системы содержится в ее статистической сумме, и извлекать ее из выражений (2.3) и (2.5) следует методами термодинамики. Только при нахождении средних значений характеристик, не являющихся термодинамическими величинами, следует проводить непосредственное усреднение с помощью функций распределения.

Для некоторых макроскопических характеристик можно записать формулы, непосредственно выражающие их через соответствующие статистические суммы. В частности, для внутренней энергии U справедливо выражение

$$U = \langle E \rangle = - \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Q \right)_V \equiv E. \quad (2.9)$$

Для среднего числа частиц $\langle N \rangle$ в большом каноническом ансамбле имеем

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial}{\partial \mu} \ln \mathcal{L} \right)_{V, \beta}. \quad (2.10)$$

§ 2.2. Классические и квантовые функции распределения

В каноническом ансамбле квантовая функция распределения (оператор плотности) определяется соотношением

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Q} \exp \left(- \frac{\hat{H}}{kT} \right). \quad (2.11)$$

где \hat{H} — оператор Гамильтона системы, а Q — ее статистическая сумма: $Q = \text{Sp} \exp \left(- \frac{\hat{H}}{kT} \right)$. Среднее значение физической величины \hat{A} дается формулой

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Sp} \left(\hat{\rho} \hat{A} \right) \quad (\text{Sp} \hat{\rho} = 1). \quad (2.12)$$

Часто функция распределения задается в каком-либо конкретном представлении. Например, в энергетическом представлении соотношения (2.11) и (2.12) принимают вид

$$w_n = \frac{1}{Q} \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right), \quad (2.13)$$

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Q} \sum_n A(E_n) \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right), \quad (2.14)$$

где $A(E_n)$ — диагональный матричный элемент оператора \hat{A} в энергетическом представлении. Классические аналоги формул (2.13) и (2.14) записываются следующим образом:

$$w(E) = \frac{1}{Q} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right), \quad (2.15)$$

$$\langle A \rangle = \int dE \rho(E) w(E) A(E), \quad (2.16)$$

где $\rho(E)$ — плотность состояний в энергетическом представлении.

В классических системах часто используются функции распределения по координатам и импульсам. Написав для функции Гамильтона выражение

$$H(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) \equiv H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}),$$

где потенциальная энергия $U(\mathbf{r})$ зависит только от координат частиц, можно представить распределение (2.11) в виде

$$\rho(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) \equiv \rho(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{3N} n(\mathbf{r}) \prod_{i=1}^N f(\mathbf{p}_i).$$

Здесь функция распределения по координатам

$$n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv n(\mathbf{r}) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{U(\mathbf{r})}{kT}\right),$$

а Z — конфигурационный интеграл:

$$Z = \frac{1}{N!} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \exp\left(-\frac{U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{kT}\right).$$

Одночастичная функция распределения по импульсам определена равенством

$$f(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi mkT)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\mathbf{p}^2}{2mkT}\right).$$

Функция $f(\mathbf{p})$ распадается на произведение трех функций:

$$f(\mathbf{p}) = f(p_x) f(p_y) f(p_z), \quad f(p_x) = \frac{1}{(2\pi mkT)^{1/2}} \exp\left(-\frac{p_x^2}{2mkT}\right).$$

С помощью введенных функций средние значения физических величин, зависящих только от координат или только от импульсов, определяются формулами

$$\langle A \rangle = \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) A(\mathbf{r}), \quad (2.17)$$

$$\langle B \rangle = \int d\mathbf{p} f(\mathbf{p}) B(\mathbf{p}). \quad (2.18)$$

Интеграл в (2.17) вычисляется по координатам всех частиц системы. Интегрирование по \mathbf{p} в (2.18) проводится по импульсной переменной одной частицы.

Если под U понимается только энергия взаимодействия частиц системы с внешним полем

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N U(\mathbf{r}_i),$$

то функция $n(\mathbf{r})$ аналогично функции распределения по импульсам распадается на произведение функций распределения отдельных частиц:

$$n(\mathbf{r}) = \prod_{i=1}^N n(\mathbf{r}_i),$$

нормированных условием

$$\int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) = 1.$$

При этом интеграл по \mathbf{r} в (2.17) распадается на произведение интегралов по координатам каждой частицы системы.

Использование функций распределения бывает удобным, когда требуется найти среднее значение микроскопической величины, которая не является термодинамической переменной.

Практически важным случаем является система заряженных частиц в электромагнитном поле. В классическом случае функция Гамильтона системы записывается в виде

$$H = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{2m_i} \left(\mathbf{p}_i - \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \right)^2 + e_i \varphi(\mathbf{r}_i) \right\}, \quad (2.19)$$

где $\varphi(\mathbf{r}_i)$ и $\mathbf{A}(\mathbf{r}_i)$ — скалярный и векторный потенциал поля в точке \mathbf{r}_i , e_i — электрические заряды частиц.

В квантовом случае оператор Гамильтона в пренебрежении спином частиц имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\left(\hat{\mathbf{p}}_i - \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \right)^2}{2m_i} + e_i \varphi(\mathbf{r}_i) \right\}. \quad (2.20)$$

При помещении системы заряженных частиц в постоянное однородное магнитное поле с индукцией $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$ удобно выбрать выражение для векторного потенциала в виде

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}_i) = (0, Bx, 0), \quad (2.21)$$

что соответствует магнитному полю, направленному по оси Z .

Решение уравнения Шредингера в пренебрежении взаимодействием частиц между собой и спиновым расщеплением энергетических уравнений в магнитном поле приводит к следующему энергетическому спектру:

$$\varepsilon_{n,p_z} = \frac{p_z^2}{2m} + \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.22)$$

где $\omega_c = \frac{|e|B}{mc}$ — циклотронная частота, $n = 0, 1, 2, \dots$ — номер осциллятора Ландау. Квантовое состояние заряженной частицы в магнитном поле характеризуется четырьмя квантовыми числами — n, p_z, p_y, σ (σ — спиновое квантовое число), так как оператор \hat{p}_y коммутирует с гамильтонианом при выборе векторного потенциала в виде (2.21), а спиновый оператор $\hat{\mathbf{S}}$ вообще не входит в гамильтониан. Поэтому энергетические уровни (2.22) оказываются дважды вырожденными по спину и вырожденными с непрерывной кратностью по p_y , которое характеризует положение центра осциллятора Ландау (или положение центра окружности, по которой обращается заряженная частица в классическом случае) $x_c = \frac{p_y}{(m\omega_c)}$.

Задачи

1. Найти уравнение состояния, внутреннюю энергию и теплоемкость классического идеального одноатомного газа, рассматривая его статистическую сумму в каноническом ансамбле.

Решение. Функция Гамильтона для одноатомного идеального газа из N частиц имеет вид

$$H(q, p) = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}.$$

Интеграл по фазовому объему системы распадается на произведение интегралов по пространственным и импульсным переменным. Интеграл по координатам каждой частицы дает объем V системы. Интеграл по импульсам распадается на произведение $3N$ интегралов гауссова вида

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}.$$

Поэтому выражение для статистической суммы Q_N принимает вид

$$Q_N = \frac{V^N}{h^{3N} N!} (2\pi m k T)^{\frac{3N}{2}}.$$

Свободная энергия F системы определяется соотношением (2.3). Используя формулу Стирлинга

$$\ln N! = N \ln \frac{N}{e},$$

находим

$$F = -kTN \left(\ln \frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln T + \text{const} \right).$$

В константу объединены члены, не зависящие от N , V и T . Теперь с помощью термодинамического соотношения

$$dF = -SdT - pdV$$

находим

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = kTN \frac{1}{V/N} \frac{1}{N} = \frac{kTN}{V},$$

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = kT \left(\frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln T + \text{const} \right) + \frac{3}{2} kN.$$

Теплоемкость можно найти по формуле

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = \frac{3}{2} kN.$$

Внутренняя энергия U может быть найдена с помощью любого из соотношений

$$U = F + TS = F - T \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = -T^2 \left(\frac{\partial}{\partial T} \frac{F}{T} \right)_V = \frac{3}{2} NkT$$

или непосредственно из формулы (2.9).

2. Идеальный газ находится в вертикальном сосуде, закрытом сверху подвижным поршнем массы m_0 , который может перемещаться без трения. Найдите уравнение состояния такого газа.

Решение. Указанная в условии задачи физическая система описывается изотермо-изобарическим ансамблем, в котором распределение по различным состояниям задается нормированной на единицу функцией

$$P_{l,V} = \exp \left(\frac{\Phi - pV - E_l}{kT} \right), \quad (2.23)$$

где E_l — энергия системы в состоянии, задаваемом набором квантовых чисел l , p и V — давление и объем газа, а Φ — термодинамический потенциал Гиббса, равный

$$\Phi = U + pV - TS. \quad (2.24)$$

Прийти к выражению (2.23) можно, записав функцию Гамильтона системы в виде

$$H = H_\Gamma(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i) + \frac{p_0^2}{2m_0} + m_0gz, \quad (2.25)$$

где $H_\Gamma(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$ — функция Гамильтона для молекул газа, характеризуемых радиус-векторами \mathbf{r}_i и импульсами \mathbf{p}_i , \mathbf{p}_0 — импульс поршня, а z — координата, определяющая его положение. В равновесии, очевидно,

$$m_0g = pA, \quad (2.26)$$

где A — площадь поршня. Выбрав начало отсчета по оси z на дне поршня, можно переписать последнее слагаемое в правой части (2.25) в виде:

$$m_0gz = pAz = pV. \quad (2.27)$$

С учетом (2.25) и (2.27) распределение Гиббса записывается в виде (2.23), где множитель $\exp\left(\frac{\Phi}{kT}\right)$ обеспечивает нормировку функции распределения на единицу.

Статистическая сумма в изотермо-изобарическом ансамбле записывается следующим образом:

$$\Delta = \sum_{l,V} e^{-\frac{E_l+pV}{kT}}. \quad (2.28)$$

Для рассматриваемой системы, состоящей из классического идеального газа, содержащего N молекул, и подвижного поршня, соотношение (2.28) принимает вид

$$\Delta = \frac{(2\pi mkT)^{\frac{3N}{2}}}{h^{3N} N!} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{p_0^2}{2m_0 kT}\right) dp_0 \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{pV}{kT}\right) V^N dV. \quad (2.29)$$

Последний интеграл в правой части (2.29) вычисляется N -кратным дифференцированием по параметру, стоящему множителем при объеме V в показателе экспоненты:

$$\int_0^{\infty} e^{-\alpha V} V^N dV = \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha}\right)^N \int_0^{\infty} e^{-\alpha V} dV = \frac{N!}{\alpha^{N+1}}.$$

В результате выражение (2.29) для Δ оказывается равным:

$$\Delta = \frac{1}{h^{3N}} (2\pi m)^{\frac{3N+1}{2}} \left(\frac{m_0}{m}\right)^{\frac{1}{2}} (kT)^{\frac{5N+3}{2}} \frac{1}{p^{N+1}}. \quad (2.30)$$

Термодинамический потенциал Φ связан с Δ соотношением:

$$\Phi = -kT \ln \Delta. \quad (2.31)$$

Поскольку для дифференциала Φ справедливо

$$d\Phi = -SdT + Vdp + \mu dN, \quad (2.32)$$

то с помощью (2.30) и (2.31) находим:

$$V = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial p}\right)_{T,N} = \frac{N+1}{p} kT. \quad (2.33)$$

Соотношение (2.33), в котором под V следует понимать средний объем газа $\langle V \rangle$ под поршнем, является искомым уравнением состояния. Поскольку $N \gg 1$, то $(N+1)$ в (2.33) можно заметить на N , и мы приходим к обычному уравнению состояния идеального газа.

3. С помощью большого канонического ансамбля Гиббса покажите, что вероятность того, что классическая система имеет N не взаимодействующих между собой частиц, дается распределением Пуассона.

Решение. Функция распределения вероятностей в большом каноническом ансамбле имеет вид

$$P_{N,l} = \frac{1}{L(\mu, T)} e^{\frac{\mu N - E_l}{kT}}, \quad (2.34)$$

где $\mathcal{L}(\mu, T)$ — статистическая сумма большого канонического ансамбля, определяемая соотношением:

$$\mathcal{L}(\mu, T) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_l e^{\frac{\mu N - E_l}{kT}} = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\frac{\mu N}{kT}} Q_N(T). \quad (2.35)$$

Входящая в (2.35) статистическая сумма канонического ансамбля для классического газа из N невзаимодействующих частиц равна:

$$Q_N(T) = \frac{V^N}{h^{3N} N!} (2\pi mkT)^{\frac{3N}{2}}. \quad (2.36)$$

В результате для $\mathcal{L}(\mu, T)$ находим:

$$\mathcal{L}(\mu, T) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{V^N}{h^{3N} N!} (2\pi mkT)^{\frac{3N}{2}} e^{\frac{\mu N}{kT}} = \exp\left(e^{\frac{\mu}{kT}} \frac{V}{\lambda^3}\right), \quad (2.37)$$

где $\lambda = h(2\pi mkT)^{-\frac{1}{2}}$ — длина «тепловой» волны де Бройля.

С учетом соотношений (2.34)–(2.37) вероятность того, что рассматриваемая система имеет N частиц, записывается в виде

$$P_N = \frac{1}{\mathcal{L}(\mu, T)} Q_N e^{\frac{\mu N}{kT}} = \frac{1}{N!} \frac{\left(\frac{V}{\lambda^3}\right)^N e^{\frac{\mu N}{kT}}}{\exp\left(e^{\frac{\mu}{kT}} \frac{V}{\lambda^3}\right)}. \quad (2.38)$$

Вводя обозначение

$$\bar{N} = e^{\frac{\mu}{kT}} \frac{V}{\lambda^3}, \quad (2.39)$$

переписываем соотношение (2.38) в виде

$$P_N = \frac{1}{N!} e^{-\bar{N}} \bar{N}^N,$$

который соответствует распределению Пуассона. Отметим, что величина \bar{N} , определяемая соотношением (2.39), имеет смысл среднего числа частиц $\langle N \rangle$ системы. Действительно, вычисляя

среднее число частиц с помощью функции распределения большого канонического ансамбля, имеем:

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\mathcal{L}(\mu, T)} \sum_{N=0}^{\infty} N e^{\frac{\mu N}{kT}} Q_N(T) = kT \frac{\partial \ln \mathcal{L}}{\partial \mu}. \quad (2.40)$$

Используя соотношение (2.37) для $\mathcal{L}(\mu, T)$, получаем с помощью (2.40)

$$\langle N \rangle = e^{\frac{\mu N}{kT}} \frac{V}{\lambda^3} = \bar{N}.$$

Таким образом, рассмотрение, основанное на использовании метода ансамблей Гиббса, приводит к тому же результату, что и расчеты, основанные на вероятностных соображениях.

4. Найти уравнение состояния, внутреннюю энергию и теплоемкость для ультрарелятивистского газа с законом дисперсии $\varepsilon(\mathbf{p}) = c|\mathbf{p}|$, где c — скорость света, рассматривая его статистическую сумму в каноническом ансамбле.

Решение. Поскольку функция Гамильтона H системы складывается из энергий отдельных частиц $\varepsilon(\mathbf{p})$, то выражение (2.2) для статистической суммы канонического ансамбля можно сразу записать в виде

$$Q = \frac{V^N}{h^{3N} N!} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y dp_z \exp\left(-\frac{c|\mathbf{p}|}{kT}\right) \right]^N.$$

Переходя в интеграле по импульсам к сферической системе координат, получаем

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y dp_z \exp\left(-\frac{c|\mathbf{p}|}{kT}\right) = 4\pi \int_0^{\infty} dp_p^2 \exp\left(-\frac{cp}{kT}\right).$$

Получившийся интеграл можно вычислить двукратным интегрированием по частям или с использованием интегрального представления для Γ -функции

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} dz e^{-t} t^{z-1}, \quad \operatorname{Re} z > 0.$$

В результате находим

$$Q = \frac{1}{N!} \left[\frac{V}{h^3} 8\pi \left(\frac{kT}{c}\right)^3 \right]^N. \quad (2.41)$$

Свободная энергия F , определяемая с помощью (2.41), равна

$$F = -NkT \left(\ln \frac{V}{N} + 3 \ln T + \text{const} \right).$$

Внутренняя энергия U дается формулой

$$U = -T^2 \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = 3NkT$$

или вычисляется с помощью формулы (2.9). Отсюда для C имеем

$$C_V = 3Nk.$$

Уравнение состояния имеет такой же вид, как и для классического нерелятивистского газа:

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = \frac{NkT}{V}.$$

5. Определить среднее число столкновений молекул одноатомного максвелловского газа с единичной площадью поверхности сосуда, в котором он находится, в единицу времени.

Решение. Пусть ось x перпендикулярна поверхности стенки, с которой рассматривается столкновение молекул газа. Рассмотрим молекулы, проекции импульса которых на ось x лежат в интервале $p_x, p_x + dp_x$. Очевидно, что в единицу времени столкнутся со стенкой те из молекул, скорости которых v_x направлены к стенке и которые успевают достичь стенки за единицу времени. При этом число таких молекул равно

$$d\nu = n \frac{\frac{p_x}{m} \exp\left(-\frac{p_x^2}{2mkT}\right) dp_x}{(2\pi mkT)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dp_y dp_z \exp\left(-\frac{p_y^2 + p_z^2}{2mkT}\right), \quad (2.42)$$

где n — средняя концентрация молекул. Действительно, в равновесном газе отсутствуют выделенные направления, поэтому движение молекул в направлении, перпендикулярном оси x , не влияет на столкновения молекул со стенкой, которые определяются только движением вдоль оси x .

Чтобы найти полное число столкновений в единицу времени, следует проинтегрировать выражение (2.42) по p_x в пределах от 0 до ∞ :

$$\nu = \int d\nu = \frac{n}{(2\pi mkT)^{\frac{3}{2}}} \int_0^{\infty} dp_x \frac{p_x}{m} \exp\left(-\frac{p_x^2}{2mkT}\right) \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} dp_y dp_z \exp\left(-\frac{p_y^2 + p_z^2}{2mkT}\right). \quad (2.43)$$

Выполняя интегрирование, находим

$$\nu = \frac{1}{4} n \bar{v}, \quad (2.44)$$

где \bar{v} — среднее значение модуля скорости в равновесном газе:

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}. \quad (2.45)$$

6. Определить среднюю энергию молекул максвелловского газа в веерообразном пучке, который выходит через небольшое отверстие в стенке сосуда в вакуум, и среднее значение косинуса угла между направлением скорости вылетающих молекул и нормалью к стенке сосуда.

Решение. Среднюю энергию $\langle \varepsilon \rangle$ молекул в пучке можно найти, поделив выносимую пучком в единицу времени энергию E на число вылетающих молекул, равное, очевидно, ν . Подсчитать значение E можно, сообразив, что по формуле (2.43) предыдущей задачи определяется именно число вылетающих частиц. Если умножить подынтегральное выражение на $\frac{p^2}{2m}$, то эта формула будет подсчитывать уже выносимую пучком энергию:

$$E = \frac{n}{(2\pi mkT)^{\frac{3}{2}}} \int_0^{\infty} dp_x \frac{p_x}{m} \exp\left(-\frac{p_x^2}{2mkT}\right) \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} dp_y dp_z \exp\left(-\frac{p_y^2 + p_z^2}{2mkT}\right) \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}. \quad (2.46)$$

Интегрирование в (2.46) проще всего выполнить, перейдя к сферической системе координат в пространстве импульсов, направив полярную ось вдоль x . Тогда

$$E = \frac{n}{2m^2 (2\pi mkT)^{\frac{3}{2}}} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \cos \theta \int_0^{\infty} dp p^5 \exp\left(-\frac{p^2}{2mkT}\right). \quad (2.47)$$

Интеграл по модулю импульса вычисляется с помощью интегрального представления Γ -функции. В результате получаем

$$E = 2kTv,$$

где ν определяется формулами (2.44) и (2.45) предыдущей задачи. Поэтому

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{E}{\nu} = 2kT.$$

Доля «быстрых» частиц в пучке выше, чем в равновесном газе.

Аналогично можно получить ответ и на второй вопрос в условии задачи. Для этого нужно в выражении (2.43) предыдущей задачи перейти к сферической системе координат с полярной осью вдоль x и умножить подынтегральное выражение на $\cos \theta$. Полученное значение интеграла следует разделить на ν . После несложных преобразований найдем

$$\langle \cos \theta \rangle = \frac{2}{3}.$$

Отметим, что приведенное решение имеет смысл только в том случае, когда выходящий пучок не нарушает теплового равновесия газа в сосуде, т. е. когда число вылетающих молекул много меньше полного числа частиц в сосуде.

7. Электроны испаряются с поверхности накаленной нити и образуют газ с концентрацией n , из которого с помощью последовательности щелей в экранах формируется направленный пучок с площадью поперечного сечения в 1 см^2 . Затем пучок проходит через задерживающее электрическое поле с разностью потенциалов U , останавливающее часть электронов. Найти число электронов, проходящих в единицу времени через задерживающее поле.

Решение. Будем пренебрегать взаимодействием электронов, образующих газ, между собой. Используя результаты задачи №5, нетрудно убедиться, что число электронов $d\nu$, проходящих через щели с заданной скоростью, лежащей в интервале $(v, v + dv)$, дается выражением

$$d\nu = \frac{1}{4}vdn = \pi n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^3 dv. \quad (2.48)$$

Полное число ν электронов, проходящих через задерживающее поле, равно

$$\nu = \int_{v_0}^{\infty} dv, \quad (2.49)$$

где значение v_0 определяется той кинетической энергией, которой должны обладать электроны, чтобы преодолеть задерживающее поле:

$$\frac{mv_0^2}{2} = eU. \quad (2.50)$$

Таким образом, искомое число электронов дается выражением

$$\nu = \pi n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{v_0}^{\infty} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^3 dv = \frac{n}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{kT}{m}} \left(\frac{eU}{kT} + 1 \right) e^{-\frac{eU}{kT}}. \quad (2.51)$$

Легко видеть, что при $U = 0$, т. е. в отсутствие задерживающего поля, число проходящих через щели электронов равно

$$\nu = \frac{n}{4} \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}},$$

как и должно быть в соответствии с результатом, полученным в задаче № 5.

8. Найти внутреннюю и свободную энергии и теплоемкость C_V при постоянном объеме столба одноатомного идеального газа из N молекул в трубе высотой h_0 и площадью сечения S , находящегося в однородном поле тяжести напряженностью g . Определить C_V в предельных случаях $\frac{mgh_0}{kT} \ll 1$ и $\frac{mgh_0}{kT} \gg 1$.

Решение. В рассматриваемом случае функция Гамильтона имеет вид

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N mgz_i, \quad (2.52)$$

где z_i — высота, на которой находится i -я молекула газа. При таком виде функции Гамильтона формула (2.2) содержит произведение интегралов по динамическим переменным каждой частицы. Поэтому

$$Q = \frac{1}{h^{3N} N!} \left[\int_S dx dy \int_0^{h_0} \exp\left(-\frac{mgz}{kT}\right) dz \right]^N$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y dp_z \exp\left(-\frac{p^2}{2mkT}\right) \Big]^N. \quad (2.53)$$

Интегралы в (2.53) легко вычисляются. В результате имеем

$$Q = \frac{1}{h^{3N} N!} S^N \left[1 - \exp\left(-\frac{mgh_0}{kT}\right)\right]^N \left(\frac{kT}{mg}\right)^N (2\pi mkT)^{\frac{3N}{2}}. \quad (2.54)$$

Выражение для свободной энергии получается с помощью (2.54) и имеет вид

$$F = -kT \ln Q = -NkT \left(\ln \frac{1 - \exp\left(-\frac{mgh_0}{kT}\right)}{N} + \frac{5}{2} \ln T + \text{const} \right). \quad (2.55)$$

В константу объединены члены, не зависящие от N , T и h_0 .

Внутренняя энергия

$$U = -T^2 \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = \frac{5}{2} NkT - \frac{Nmgh_0}{\exp\left(\frac{mgh_0}{kT}\right) - 1}. \quad (2.56)$$

Теплоемкость C_V в данном случае удобно найти с помощью выражения для внутренней энергии (2.56):

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{h_0} = \frac{5}{2} Nk - \frac{N \left(\frac{mgh_0}{T} \right)^2 \exp\left(\frac{mgh_0}{kT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{mgh_0}{kT}\right) - 1 \right]^2 k}. \quad (2.57)$$

С помощью соотношения (2.57) определяем C_V в указанных в условии задачи предельных случаях:

$$\text{при } \frac{mgh_0}{kT} \ll 1 \quad C_V = \frac{3}{2} Nk,$$

$$\text{при } \frac{mgh_0}{kT} \gg 1 \quad C_V = \frac{5}{2} Nk.$$

Интересно отметить, что предельные значения C_V можно определить, не вычисляя статистической суммы. При $\frac{mgh_0}{kT} \ll 1$ поле тяжести не влияет на движение частиц системы, которая может рассматриваться как идеальный газ в отсутствие поля

тяжести. При $\frac{mgh_0}{kT} \gg 1$ для ответа на поставленный вопрос можно воспользоваться теоремой вириала:

$$2\langle E_k \rangle = n\langle E_n \rangle,$$

где n — показатель однородности потенциальной энергии как функции координат. В рассматриваемом случае потенциальная энергия представляет собой однородную функцию первого порядка координаты z . Тогда

$$2\langle E_k \rangle_z = \langle E_n \rangle_z, \quad \langle E_n \rangle = \langle E_n \rangle_z = 2\frac{kTN}{2} = NkT.$$

Поэтому

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T} (\langle E_k \rangle + \langle E_n \rangle) = \frac{5}{2}Nk.$$

Кстати, почему не следует использовать теорему вириала при $\frac{mgh_0}{kT} \ll 1$?

9. Определить среднее значение высоты молекул одноатомного идеального газа, рассмотренного в задаче 8.

Решение. Поскольку координата молекулы z не является термодинамической переменной, то ее среднее значение удобно находить с помощью функции распределения. Выражение для функции Гамильтона системы имеет вид (2.52), поэтому функция распределения по координатам распадается на произведение функций распределения отдельных молекул. В результате для среднего значения координаты z оказывается справедливым выражение

$$\langle z \rangle = \int_0^{h_0} dz z \exp\left(-\frac{mgz}{kT}\right) \left[\int_0^{h_0} dz \exp\left(-\frac{mgz}{kT}\right) \right]^{-1}. \quad (2.58)$$

Элементарное вычисление интегралов, входящих в выражение (2.58), приводит к формуле

$$\langle z \rangle = \frac{kT}{mg} - \frac{h_0}{\exp\left(\frac{mgh_0}{kT}\right) - 1}. \quad (2.59)$$

Легко убедиться, что полученное выражение дает правильные результаты в рассмотренных в задаче 8 предельных случаях:

$$\langle z \rangle \rightarrow \frac{h_0}{2} \text{ при } \frac{mgh_0}{kT} \ll 1,$$

$$\langle z \rangle \rightarrow 0 \text{ при } \frac{mgh_0}{kT} \gg 1.$$

10. Каждый атом газа излучает монохроматический свет с длиной волны λ_0 и интенсивностью I_0 . Найти интенсивность излучения газа, состоящего из N атомов и находящегося в равновесном состоянии, как функцию длины волны λ .

Решение. Хаотическое тепловое движение молекул газа приводит к тому, что благодаря эффекту Доплера наблюдатель будет воспринимать свет всех длин волн. Например, от атома, который удаляется от наблюдателя вдоль оси z со скоростью v_z , будет восприниматься свет с длиной волны, равной

$$\lambda = \lambda_0 \left(1 + \frac{v_z}{c} \right). \quad (2.60)$$

В результате интенсивность света, воспринимаемого в интервале длин волн от λ до $\lambda + d\lambda$, есть

$$I(\lambda)d\lambda = \alpha dn(\lambda), \quad (2.61)$$

где $dn(\lambda)$ — число атомов во всем объеме, занятом газом, от которых воспринимается свет в интервале длин волн $[\lambda, \lambda + d\lambda]$, α — постоянный коэффициент, определяемый условием нормировки:

$$\int I(\lambda) d\lambda = NI_0. \quad (2.62)$$

Молекулы имеют распределение скоростей, определяемое законом Максвелла, поэтому

$$dn(\lambda) = dn(v_z) = N \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{mv_z^2}{2kT}} dv_z. \quad (2.63)$$

Переходя в (2.63) к λ — представлению с помощью соотношения (2.60), получим:

$$dn(\lambda) = dn(v_z) = N \left(\frac{mc^2}{2\pi\lambda_0 kT} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{mc^2}{2kT\lambda_0^2}(\lambda-\lambda_0)^2} d\lambda. \quad (2.64)$$

Теперь, используя соотношение (2.61), находим:

$$I(\lambda) d\lambda = \alpha N \frac{1}{(\pi\delta^2)^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{(\lambda-\lambda_0)^2}{\delta^2}} d\lambda, \quad (2.65)$$

где $\delta = \left(\frac{2kT\lambda_0^2}{mc^2}\right)^{\frac{1}{2}}$ — доплеровская полуширина спектральной линии. С помощью условия нормировки (2.62) определяем коэффициент α :

$$NI_0 = \frac{\alpha N}{\sqrt{\pi} \delta} \int_0^{\infty} e^{-\frac{(\lambda-\lambda_0)^2}{\delta^2}} d\lambda. \quad (2.66)$$

Нижний предел интегрирования в (2.66) можно заменить на $-\infty$, поскольку подынтегральное выражение практически равно нулю при $\lambda < 0$. В этом случае находим

$$\frac{\alpha N}{\sqrt{\pi} \delta} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(\lambda-\lambda_0)^2}{\delta^2}} d\lambda = \alpha N. \quad (2.67)$$

Сравнивая (2.66) и (2.67), получаем

$$\alpha = I_0. \quad (2.68)$$

Таким образом, спектральная плотность излучения имеет вид гауссовой кривой:

$$I(\lambda) = \frac{I_0 N}{\sqrt{\pi} \delta} e^{-\frac{(\lambda-\lambda_0)^2}{\delta^2}}, \quad (2.69)$$

ширина которой называется доплеровской шириной спектральной линии.

11. Вычислить электрический дипольный момент идеального газа, состоящего из линейных молекул с неизменным дипольным моментом \mathbf{b} , при помещении его в однородное электрическое поле напряженностью \mathbf{E} .

Решение. Функция Гамильтона рассматриваемой системы имеет вид

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N \varepsilon_i(\mathbf{M}) - \sum_{i=1}^N (\mathbf{b}_i \mathbf{E}_i).$$

Здесь первое слагаемое в правой части соответствует поступательному движению молекул, а $\varepsilon_i(\mathbf{M})$ — классическое выражение для кинетической энергии вращения как функции момента вращения \mathbf{M} . Последнее слагаемое описывает потенциальную энергию дипольных молекул в электрическом поле.

Выражение для статистической суммы имеет вид

$$Q = \frac{1}{N!h^{3N}} \left[\int d\mathbf{p}d\mathbf{r} \exp\left(-\frac{p^2}{2mkT}\right) \times \right. \\ \left. \times \int d\mathbf{M}d\tau_{\text{вр}} \exp\left(-\frac{\varepsilon(\mathbf{M})}{kT} + \frac{b^E \cos\theta}{kT}\right) \right]^2.$$

Здесь θ — угол между \mathbf{b} и \mathbf{E} . Интегрирование по $\tau_{\text{вр}}$ означает интегрирование по угловым переменным. В последнем интеграле удобно перейти к сферической системе координат, выбрав полярную ось по направлению электрического поля \mathbf{E} .

Поскольку электрический момент определяется производной от свободной энергии по напряженности поля

$$\mathbf{P} = -\left(\frac{\partial F}{\partial \mathbf{E}}\right)_{T,V}, \quad (2.70)$$

а $F = -kT \ln Q$, то для определения \mathbf{P} достаточно вычислить в явном виде только интеграл по углу θ .

Итак, выражение для Q достаточно представить в виде

$$Q = a \left(\int_0^\pi d\theta \sin\theta \exp\left(\frac{b\mathbf{E} \cos\theta}{kT}\right) \right)^N, \quad (2.71)$$

где a — коэффициент, не зависящий от напряженности электрического поля \mathbf{E} . Интеграл в (2.71) легко вычисляется и дает

$$Q = a \left(\frac{2kT}{bE}\right)^N \left(\text{sh}\left(\frac{bE}{kT}\right)\right)^N. \quad (2.72)$$

Теперь для свободной энергии справедливо выражение

$$F = F_0 - NkT \left(\ln \frac{kT}{bE} + \ln \left(\text{sh} \frac{bE}{kT} \right) \right). \quad (2.73)$$

С помощью (2.73) соотношение (2.70) дает

$$P = Nb \left(\text{cth} \frac{bE}{kT} - \frac{kT}{bE} \right).$$

Полученное выражение называется формулой Ланжевена.

12. Покажите, что в сильном электрическом поле, когда дипольный момент системы, рассмотренной в задаче 11, близок к насыщению, молекулы с незначительным дипольным моментом совершают малые колебания около положения равновесия.

Решение. Полученное в задаче 11 выражение для среднего дипольного момента системы может быть записано в виде

$$P = Nb \langle \cos \theta \rangle, \quad (2.74)$$

где $\langle \cos \theta \rangle$ — среднее значение косинуса угла θ , для которого, очевидно, справедливо:

$$\langle \cos \theta \rangle = \operatorname{cth} \frac{bE}{kT} - \frac{kT}{bE}. \quad (2.75)$$

В сильном поле выполняется неравенство $kT \ll bE$. При этом $\langle \cos \theta \rangle \approx 1$ и, следовательно, характерные углы θ малы. В таких условиях потенциальная энергия дипольного момента молекулы в электрическом поле принимает вид

$$-(\mathbf{b}_i, \mathbf{E}) = -bE \cos \theta \approx -bE \left(1 - \frac{\theta^2}{2} \right) = -bE + bE \frac{\theta^2}{2}.$$

Такой вид потенциальной энергии соответствует малым колебаниям молекулы около положения $\theta = 0$.

13. Доказать, что классическая система не может обладать магнитными свойствами (теорема Бора—ван Левен).

Решение. При наличии магнитного поля, индукция \mathbf{B} которого определяется формулой $\mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}$, где \mathbf{A} — векторный потенциал, функция Гамильтона имеет вид

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} \left[\mathbf{p}_i - \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \right]^2 + U,$$

где U — потенциальная энергия взаимодействия частиц системы. Используя выражение для статистической суммы в виде

$$Q = \frac{1}{h^{3N} N!} \int d\Gamma \exp \left(-\frac{H}{kT} \right),$$

убеждаемся, что интеграл по фазовому пространству системы можно записать следующим образом:

$$Q = \frac{1}{h^{3N} N!} \int dq \exp \left(-\frac{U}{kT} \right) \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp \left\{ -\frac{1}{2mkT} \sum_i^N \left[\mathbf{p}_i - \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \right]^2 \right\}.$$

Теперь видно, что благодаря бесконечным пределам в интегралах по импульсам можно сделать замену переменной:

$$\mathbf{p}_i - \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) = \mathbf{p}'_i.$$

В результате Q оказывается не зависящей от векторного потенциала \mathbf{A} . Следовательно, статистическая сумма Q имеет такой же вид, как и в отсутствие внешнего магнитного поля. Но это и означает, что классическая система не проявляет магнитных свойств. Известные «классические» объяснения пара- и диамагнетизма основаны на представлениях об устойчивых электронных орбитах, существование которых, однако, необъяснимо с точки зрения классической физики.

14. Вычислить классическую и квантовую статистические суммы системы из N одинаковых одномерных невзаимодействующих осцилляторов с собственной частотой ω . Найти внутреннюю энергию и теплоемкость такой системы.

Решение. Функция Гамильтона H одномерного классического осциллятора имеет вид

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}.$$

Поэтому классическая статистическая сумма одного осциллятора записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} Q_{\text{кл}} &= \frac{1}{h} \int dp dx \exp\left(-\frac{H}{kT}\right) = \\ &= \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left(-\frac{p^2}{2mkT}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{m\omega^2 x^2}{2kT}\right). \end{aligned}$$

Интегралы легко вычисляются, и в результате находим

$$Q_{\text{кл}} = \frac{kT}{\hbar\omega}, \quad \text{где } \hbar = \frac{h}{2\pi}. \quad (2.76)$$

Для квантового осциллятора статистическая сумма дается формулой

$$Q_{\text{кв}} = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)}{kT}\right).$$

Это выражение представляет собой бесконечную убывающую геометрическую прогрессию со знаменателем $\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)$. Поэтому

$$Q_{\text{кв}} = \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) \frac{1}{1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)} = \frac{1}{2 \operatorname{sh}\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right)}. \quad (2.77)$$

Отметим, что при $\frac{\hbar\omega}{kT} \ll 1$ гиперболический синус можно разложить в ряд и ограничиться первым членом разложения: $\operatorname{sh} x \approx x$. Тогда формула (2.77) переходит в классическое выражение для статистической суммы (2.76).

Очевидно, что статистическая сумма системы из N независимых одинаковых осцилляторов связана со статистической суммой одного осциллятора соотношением

$$Q_N = Q^N = \left(2 \operatorname{sh} \frac{\hbar\omega}{2kT}\right)^{-N}. \quad (2.78)$$

Внутреннюю энергию системы U можно найти с помощью формулы

$$U = -\frac{\partial}{\partial\left(\frac{1}{kT}\right)} \ln Q_N.$$

Дифференцируя соотношение (2.78), находим

$$\begin{aligned} U &= N \frac{\partial}{\partial\left(\frac{1}{kT}\right)} \ln \left(\operatorname{sh} \frac{\hbar\omega}{2kT}\right) = \\ &= N \left(\operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2kT}\right) \frac{\hbar\omega}{2} = N \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}\right). \end{aligned} \quad (2.79)$$

В классическом пределе $\frac{\hbar\omega}{kT} \ll 1$, отсюда получаем

$$U_{\text{кл}} = NkT. \quad (2.80)$$

Теплоемкость системы можно найти, дифференцируя по температуре выражение для внутренней энергии (2.79):

$$C = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{N,\omega} = Nk \frac{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)}{\left(\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1\right)^2} \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2.$$

В классическом пределе $\frac{\hbar\omega}{kT} \ll 1$, откуда находим $C = Nk$, что совпадает с результатом, полученным непосредственно с помощью (2.80).

15. Определите число осцилляторов, имеющих энергию, равную или большую заданной величины $\varepsilon_1 = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$ из общего числа N одинаковых независимых одномерных осцилляторов, рассмотренных в задаче 14.

Решение. Число $N(\varepsilon_n)$ осцилляторов с заданным значением энергии $\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$ определяется выражением

$$N(\varepsilon_n) = \frac{N}{Q} e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}}. \quad (2.81)$$

Подставляя сюда значение статистической суммы Q , даваемое формулой (2.77), получим:

$$N(\varepsilon_n) = N e^{\frac{\hbar\omega}{2kT}} \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}\right) e^{-\frac{\hbar\omega}{kT} \left(n + \frac{1}{2}\right)} = N \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}\right) e^{-\frac{\hbar\omega n}{kT}}. \quad (2.82)$$

Теперь для числа $N_{\varepsilon \geq \varepsilon_1}$ осцилляторов с энергией, не меньшей ε_1 , найдем

$$\begin{aligned} N_{\varepsilon \geq \varepsilon_1} &= N \left\{ \exp\left(-\frac{\hbar\omega n_1}{kT}\right) - \exp\left(-\frac{\hbar\omega (n_1 + 1)}{kT}\right) + \right. \\ &\quad \left. + \exp\left(-\frac{\hbar\omega (n_1 + 1)}{kT}\right) - \exp\left(-\frac{\hbar\omega (n_1 + 2)}{kT}\right) + \dots \right\} = \\ &= N \exp\left(-\frac{\hbar\omega n_1}{kT}\right). \end{aligned} \quad (2.83)$$

Обратим внимание на то, что энергия нулевых колебаний не входит в выражение для $N_{\varepsilon \geq \varepsilon_1}$.

16. Определите средний линейный размер l двухатомной молекулы, совершающей гармонические колебания около равновесного положения, в котором длина молекулы равна l_0 .

Решение. Обозначим смещение каждого атома при колебаниях через x . Тогда для среднего размера молекулы имеем

$$l = l_0 + 2 \langle x \rangle = l_0 + 2C \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{m\omega^2 x^2}{2kT}} dx = l_0,$$

поскольку под интегралом стоит нечетная функция.

В рассматриваемом гармоническом приближении совершающая колебания молекула не испытывает теплового расширения. Обобщая приведенное рассмотрение, можно доказать справедливость этого утверждения для кристаллов. Таким образом, тепловое расширение кристаллов связано с ангармоничностью колебаний образующих его молекул или ионов.

17. Пользуясь соотношением (2.7), показать, что выражение для плотности состояний $\rho(E)$ может быть представлено в виде

$$\rho(E) = \sum_i \delta(E - E_i), \quad (2.84)$$

где $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака.

Решение. Подставим в формулу (2.7) выражение (2.1) для статистической суммы $Q = \sum_l e^{-\beta E_l}$:

$$\rho(E) = \sum_l \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} e^{\beta(E-E_l)} d\beta.$$

Совершаем замену переменной $\beta = ix$:

$$\rho(E) = \sum_l \frac{1}{2\pi} \int_{-i\sigma-\infty}^{-i\sigma+\infty} e^{[ix(E-E_l)]} dx.$$

Учитывая, что подынтегральная функция не имеет особенностей в нижней полуплоскости комплексной переменной x , и используя интегральное представление для δ -функции, приходим к выражению (2.84) для $\rho(E)$.

18. Вычислить плотность одночастичных состояний для нерелятивистского одноатомного ферми—бозе-газа с законом дисперсии $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$.

Решение. Воспользуемся соотношением (2.84) предыдущей задачи:

$$\rho(\varepsilon) = \sum_i \delta(\varepsilon - \varepsilon_i).$$

Квантовые числа, характеризующие состояние частицы в рассматриваемом случае, — это проекции импульса p_x, p_y, p_z и спи-

новое квантовое число σ :

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{p_x, p_y, p_z, \sigma} \delta\left(\varepsilon - \frac{p^2}{2m}\right). \quad (2.85)$$

Суммирование по σ дает множитель $g = 2s + 1$, где s — значение спина. Например, для электронов $s = \frac{1}{2}$ и $g = 2$. Суммирование по проекциям импульсов можно заменить интегрированием по правилу

$$\sum_{p_x} \rightarrow \frac{L_x}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp_x,$$

где L_x — линейный размер системы по оси x . Переходя теперь в (2.85) к сферической системе координат и выполняя интегрирование по углам, находим

$$\rho(\varepsilon) = \frac{4\pi g V}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{\infty} dp p^2 \delta\left(\varepsilon - \frac{p^2}{2m}\right), \quad V = L_x L_y L_z.$$

Совершая замену переменной $\frac{p^2}{2m} = x$, имеем

$$\rho(\varepsilon) = g \frac{V m^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}}}{2^{\frac{1}{2}} \pi^2 \hbar^3}. \quad (2.86)$$

Нетрудно убедиться, что именно к такому выражению мы и придем, подсчитывая сначала число одночастичных состояний $g \frac{d\mathbf{p}d\mathbf{r}}{(2\pi\hbar)^3}$ для частиц с энергетическим спектром $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$ в элементе объема фазового пространства $d\mathbf{p}d\mathbf{r}$, вычисляя плотность состояний $\rho(p)$ при любых значениях координат частицы и любой ориентации ее импульса и переходя затем к энергетическому представлению. Однако изложенный в решении задачи метод обладает большей общностью и применим в более сложных случаях при произвольном виде энергетического спектра.

19. Вычислить плотность состояний для нерелятивистского электронного газа в квантующем магнитном поле \mathbf{B} , пренебрегая спиновым расщеплением энергетических уровней.

Решение. Закон дисперсии в указанном приближении при условии, что магнитное поле направлено вдоль оси z , имеет вид

$$\varepsilon_{n,p_z,\sigma} = \frac{p_z^2}{2m} + \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

где $\omega_c = \frac{eB}{mc}$ — циклотронная частота, $n = 0, 1, 2, \dots$ — номер осциллятора Ландау. Энергетический спектр электрона вырожден по квантовому числу p_y , характеризующему положения центра осциллятора Ландау:

$$x_c = \frac{p_y}{m\omega_c}.$$

Используя обычное выражение для плотности состояния (2.84), имеем

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{\sigma,n,p_z,p_y} \delta \left(\frac{p_z^2}{2m} + \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) - \varepsilon \right). \quad (2.87)$$

Суммирование по спиновой переменной дает множитель 2. Переходя от суммирования по p_z и p_y к интегрированию, следует аккуратно выбрать пределы интегрирования. Очевидно, что интеграл по p_z берется в бесконечных пределах. При рассмотрении объемных свойств пространственно однородной системы естественно предположить, что центр осциллятора Ландау лежит внутри образца:

$$0 \leq x_c \leq L_x,$$

где L_x — линейный размер системы вдоль оси x . Это приводит к условию, накладываемому на p_y :

$$0 \leq p_y \leq m\omega_c L_x.$$

Итак, для $\rho(\varepsilon)$ с помощью (2.87) имеем

$$\rho(\varepsilon) = 2 \frac{L_z}{2\pi\hbar} \frac{L_y}{2\pi\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \int_0^{m\omega_c L_x} dp_y \delta \left(\varepsilon - \frac{p_z^2}{2m} - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \right).$$

Интеграл по p_y вычисляется элементарно. Так как подынтегральное выражение есть четная функция p_z , то

$$\rho(\varepsilon) = 2 \frac{Vm\omega_c}{(2\pi\hbar)^2} 2 \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dp_z \delta \left(\varepsilon - \frac{p_z^2}{2m} - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \right),$$

где $V = L_x L_y L_z$. В интеграле по p_z удобно сделать замену

переменной $\frac{p_z^2}{2m} = x$.

В результате получим

$$\rho(\varepsilon) = \frac{Vm^{\frac{3}{2}}\omega_c}{2^{\frac{1}{2}}\pi^2\hbar^2} \sum_n \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)}}. \quad (2.88)$$

В этой формуле суммирование проводится по таким значениям $n = 0, 1, 2, \dots$, при которых под корнем стоит неотрицательное число.

Легко убедиться, что выражение (2.88) переходит в формулу для плотности состояний в отсутствие магнитного поля при $\omega_c \rightarrow 0$. Действительно, при $\omega_c \rightarrow 0$ суммирование по n в (2.88) заменяется интегрированием

$$\rho(\varepsilon) = \frac{Vm^{\frac{3}{2}}\omega_c}{2^{\frac{1}{2}}\pi^2\hbar^2} \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{\varepsilon}{\hbar\omega_c} - \frac{1}{2}} \frac{dx}{\sqrt{\varepsilon - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)}}.$$

Элементарное вычисление этого интеграла приводит к формуле (2.86) задачи 18.

20. Показать, что в координатном представлении ненормированный оператор плотности $\hat{\rho}$ для системы с гамильтонианом $H(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})$ может быть записан в виде

$$\langle \mathbf{r}_1 | \exp \left[-\beta H \left(\mathbf{r}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \right] | \mathbf{r}_2 \rangle = \exp \left[-\beta H \left(\mathbf{r}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \right] \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (2.89)$$

Решение. Будем исходить из выражения для оператора плотности в координатном представлении

$$\langle \mathbf{r}_1 | \exp \left[-\beta H \left(\mathbf{r}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \right] | \mathbf{r}_2 \rangle = \sum_n \exp(-\beta E_n) \psi_n(\mathbf{r}_1) \psi_n^*(\mathbf{r}_2), \quad (2.90)$$

где собственные функции $\psi_n(\mathbf{r})$ и собственные значения оператора энергии E_n определяются уравнением Шредингера для стационарных состояний

$$H \left(\mathbf{r}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \psi_n(\mathbf{r}) = E_n \psi_n(\mathbf{r}). \quad (2.91)$$

Используя понятие функции от оператора $\hat{\varphi}(A)$ как оператора, у которого собственные функции ψ_n совпадают с собственными

функциями оператора \widehat{A} , а собственные значения φ_n равны значениям функции $\varphi(A_n)$ от собственных значений A_n оператора \widehat{A} , имеем

$$\exp \left[-\beta H \left(\mathbf{r}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \right] \psi_n = \exp(-\beta E_n) \psi_n(\mathbf{r}). \quad (2.92)$$

С помощью (2.92) выражение (2.90) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_1 | \exp \left[-\beta H \left(\mathbf{r}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \right] | \mathbf{r}_2 \rangle &= \\ &= \exp \left[-\beta H \left(\mathbf{r}_1, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \right) \right] \sum_n \psi_n(\mathbf{r}_1) \psi_n^*(\mathbf{r}_2). \end{aligned}$$

Используя свойство полноты системы собственных функций оператора H

$$\sum_n \psi_n(\mathbf{r}_1) \psi_n^*(\mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2),$$

приходим к формуле (2.89).

Обратим еще раз внимание на то, что формула (2.89) определяет ненормированный оператор плотности.

21. Построить оператор плотности одномерного гармонического осциллятора в координатном представлении.

Решение. Как и в предыдущей задаче, будем рассматривать ненормированный оператор плотности. Аналогично (2.90) имеем

$$\langle x_1 | \exp(-\beta H(x)) | x_2 \rangle = \sum_n \exp(-\beta E_n) \psi_n(x_1) \psi_n(x_2). \quad (2.93)$$

Для гармонического осциллятора собственные функции $\psi_n(x)$ и значения энергии E_n даются формулами

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} (2^n n!)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{q^2}{2}\right) H_n(q), \\ E_n &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (2.94)$$

где $H_n(q)$ — полиномы Эрмита, $q = \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} x$, $n = 0, 1, 2, \dots$,

$$H_n(q) = (-1)^n \exp q^2 \left(\frac{d}{dq} \right)^n \exp(-q^2). \quad (2.95)$$

Для вычисления по формуле (2.93) удобно воспользоваться интегральным представлением полиномов Эрмита

$$H_n(q) = \pi^{-\frac{1}{2}} e^{q^2} \int_{-\infty}^{\infty} du (-2iu)^n \exp(-u^2 + 2iqu). \quad (2.96)$$

Теперь соотношение (2.93) переписывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle x_1 | \exp(-\beta H(x)) | x_2 \rangle &= \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\pi} \exp\left(\frac{q_1^2 + q_2^2}{2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dudv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-2uv)^n}{n!} \times \\ &\times \exp\left[-\beta\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - u^2 + 2iq_1u - v^2 + 2iq_2v\right]. \end{aligned} \quad (2.97)$$

Под знаком суммы по n в (2.97) стоят слагаемые, соответствующие разложению $\exp[-uv \exp(-\beta\hbar\omega)]$ в ряд Тейлора. Поэтому выражение (2.97) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \langle x_1 | \exp(-\beta H(x)) | x_2 \rangle &= \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\pi} \exp\left(\frac{q_1^2 + q_2^2}{2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dudv \exp\left(-\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \times \\ &\times \exp\left[-u^2 + 2iq_1u - v^2 + 2iq_2v - 2uv \exp(-\beta\hbar\omega)\right]. \end{aligned} \quad (2.98)$$

Для вычисления интегралов в (2.98) можно воспользоваться формулой

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots dx_n \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^n a_{ik} x_i x_k + i \sum_{l=1}^n b_l x_l\right) &= \\ &= \frac{(2\pi)^{\frac{n}{2}}}{|a_{ik}|^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{j,l=1}^n (a_{jl})^{-1} b_j b_l\right), \end{aligned}$$

где $|a_{ik}|$ — определитель матрицы (a_{ik}) , а $(a_{ik})^{-1}$ — обратная матрица. В рассматриваемом случае

$$\begin{aligned} |a_{ik}| &= 4 [1 - \exp(-2\beta\hbar\omega)], \\ (a_{ik}) &= 2 \begin{pmatrix} 1 & \exp(-\beta\hbar\omega) \\ \exp(-\beta\hbar\omega) & 1 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

а обратная матрица

$$(a_{ik})^{-1} = \frac{1}{2[1 - \exp(-2\beta\hbar\omega)]} \begin{pmatrix} 1 & -\exp(-\beta\hbar\omega) \\ -\exp(-\beta\hbar\omega) & 1 \end{pmatrix}.$$

Теперь получаем

$$\begin{aligned} \langle x_1 | \exp(-\beta H(x)) | x_2 \rangle &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\exp\left(-\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}{[1 - \exp(-2\beta\hbar\omega)]^{\frac{1}{2}}} \times \\ &\times \exp \left\{ \frac{q_1^2 + q_2^2}{2} - \frac{1}{1 - \exp(-2\beta\hbar\omega)} [q_1^2 - 2q_1q_2 \exp(-\beta\hbar\omega) + q_2^2] \right\}. \end{aligned} \quad (2.99)$$

Используя соотношения

$$\operatorname{th} \frac{\beta\hbar\omega}{2} = \frac{\operatorname{ch}(\beta\hbar\omega) - 1}{\operatorname{sh}(\beta\hbar\omega)} = \frac{\operatorname{sh}(\beta\hbar\omega)}{1 + \operatorname{ch}(\beta\hbar\omega)},$$

можно привести (2.99) к виду

$$\begin{aligned} \langle x_1 | \exp(-\beta H(x)) | x_2 \rangle &= \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar \operatorname{sh}(\beta\hbar\omega)} \right)^{\frac{1}{2}} \times \\ &\times \exp \left\{ -\frac{m\omega}{4\hbar} \left[(x_1 + x_2)^2 \operatorname{th} \frac{\beta\hbar\omega}{2} + (x_1 - x_2)^2 \operatorname{cth} \frac{\beta\hbar\omega}{2} \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.100)$$

Не представляет труда вычислить нормированный оператор плотности. Полагая в (2.100) $x_1 = x_2$, находим

$$\operatorname{Sp} \exp(-\beta H) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x | \exp(-\beta H) | x \rangle = \left[2 \operatorname{sh}(\beta\hbar\omega) \operatorname{th} \frac{\beta\hbar\omega}{2} \right]^{-\frac{1}{2}}.$$

В результате получаем

$$\begin{aligned} \rho(x_1, x_2) &= \frac{\langle x_1 | \exp(-\beta H(x)) | x_2 \rangle}{\operatorname{Sp} \exp(-\beta H)} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \operatorname{th} \frac{\beta\hbar\omega}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \times \\ &\times \exp \left\{ -\frac{m\omega}{4\hbar} \left[(x_1 + x_2)^2 \operatorname{th} \frac{\beta\hbar\omega}{2} + (x_1 - x_2)^2 \operatorname{cth} \frac{\beta\hbar\omega}{2} \right] \right\}. \end{aligned}$$

22. Покажите, что ненормированный оператор плотности $\rho(\beta) = \exp(-\beta H)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = -H\rho, \quad (2.101)$$

называемому уравнением Блоха.

Какой вид имеет начальное условие для этого уравнения? Найдите решение уравнения (2.101) для одномерного движения свободной частицы.

Решение. В энергетическом представлении оператор плотности можно записать в виде

$$\rho_{ij} = \delta_{ij} e^{-\beta E_i}. \quad (2.102)$$

Дифференцируя (2.102) по β , получаем

$$\frac{\partial \rho_{ij}}{\partial \beta} = -\delta_{ij} E_i e^{-\beta E_i} = -E_i \rho_{ij}. \quad (2.103)$$

Откуда следует уравнение (2.101).

Начальное условие для уравнения (2.101), очевидно, имеет вид

$$\rho(0) = 1. \quad (2.104)$$

В координатном представлении уравнение (2.101) записывается следующим образом:

$$\frac{\partial \rho(x, x')}{\partial \beta} = -H_x \rho(x, x'), \quad (2.105)$$

где индекс « x » у H_x означает, что оператор H действует на переменную x . Начальное условие для уравнения (2.105) записывается как

$$\rho(x, x')|_{\beta=0} = \delta(x - x'). \quad (2.106)$$

В случае одномерного движения свободной частицы уравнение (2.105) принимает вид

$$\frac{\partial \rho(x, x')}{\partial \beta} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, x'). \quad (2.107)$$

Уравнение (2.107) имеет вид уравнения диффузии. Поэтому его решение можно заменить следующим образом:

$$\rho(x, x') = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} (x - x')^2 \right). \quad (2.108)$$

Выбранный в (2.108) численный множитель обеспечивает выполнение начального условия (2.106). Вычисляя шпур обеих частей (2.108)

$$\int \rho(x, x) dx = L \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right) = \exp(-\beta F), \quad (2.109)$$

находим статистическую сумму для одномерной системы длиной L .

Очевидно, что для свободного трехмерного газа с числом частиц N справедливо

$$\exp(-\beta F) = V^N \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{\frac{3N}{2}}. \quad (2.110)$$

Разумеется, выражение (2.110) можно получить непосредственно с помощью соотношения (2.90).

Считая, что невзаимодействующие частицы находятся в ящике объемом V , можно записать для волновых функций $\psi_n(\mathbf{r})$:

$$\psi_n(\mathbf{r}) \rightarrow \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}\right). \quad (2.111)$$

Переход по обычному правилу от суммирования по \mathbf{p} к интегрированию

$$\sum_{\mathbf{p}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \quad (2.112)$$

получаем с помощью соотношения (2.90):

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(-\frac{\beta\mathbf{p}^2}{2m}\right) \exp\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}, \mathbf{r} - \mathbf{r}') = \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{m(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{2\hbar^2\beta}\right). \end{aligned} \quad (2.113)$$

Отсюда, аналогично переходу от (2.118) к (2.119), непосредственно получается соотношение (2.110).

23. Спиновый гамильтониан электрона в магнитном поле

$$\hat{H} = -\mu\hat{\sigma}\hat{\mathbf{B}}, \quad (2.114)$$

где μ — магнетон Бора, $\hat{\sigma}$ — спиновый оператор Паули, \mathbf{B} — индукция магнитного поля. Считая ось z направленной вдоль магнитного поля, найти среднее значение σ_z в ансамбле с фиксированной температурой.

Решение. При указанном направлении магнитного поля гамильтониан (2.114) переписывается так:

$$\hat{H} = -\mu B \hat{\sigma}_z, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Используя понятие функции от оператора, запишем $\exp(-\beta\hat{H})$ в виде

$$\exp(-\beta H) = \begin{pmatrix} \exp(\beta\mu B) & 0 \\ 0 & \exp(-\beta\mu B) \end{pmatrix}.$$

Нормированный оператор плотности можно записать:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2\text{ch}(\beta\mu B)} \begin{pmatrix} \exp(\beta\mu B) & 0 \\ 0 & \exp(-\beta\mu B) \end{pmatrix}.$$

Теперь для среднего значения $\hat{\sigma}_z$ имеем

$$\langle \hat{\sigma}_z \rangle = \text{Sp}(\hat{\rho}\hat{\sigma}_z) = \text{th}(\beta\mu B).$$

Ответ можно получить, не находя явного выражения для оператора плотности. Поскольку $\hat{\sigma}_z^2 = I$, то справедливо равенство

$$\begin{aligned} \exp(\beta\mu B \hat{\sigma}_z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\beta\mu B \hat{\sigma}_z)^n = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} (\beta\mu B)^{2k} I + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)!} (\beta\mu B)^{2k+1} \hat{\sigma}_z. \end{aligned} \quad (2.115)$$

В правой части выражения (2.115) стоят разложения в ряды Тейлора гиперболических синуса и косинуса:

$$\exp(\beta\mu B \hat{\sigma}_z) = \text{ch}(\beta\mu B) \cdot I + \text{sh}(\beta\mu B) \cdot \hat{\sigma}_z.$$

Теперь легко видеть, что

$$\text{Sp} \exp(\beta\mu B \hat{\sigma}) = 2 \text{ch}(\beta\mu B), \quad \text{Sp} [\hat{\sigma}_z \exp(\beta\mu B \hat{\sigma})] = 2 \text{sh}(\beta\mu B).$$

Из последних выражений следует, что

$$\langle \hat{\sigma}_z \rangle = \frac{\text{Sp} [\hat{\sigma}_z \exp(\beta\mu B \hat{\sigma}_z)]}{\text{Sp} \exp(\beta\mu B \hat{\sigma}_z)} = \text{th}(\beta\mu B).$$

24. Статистический оператор равновесного состояния может быть записан в виде

$$\rho = \rho(0) = \sum_j w_j |j(0)\rangle \langle j(0)|, \quad (2.116)$$

если система с вероятностью w_j находится в состоянии $|j\rangle$. Однако даже при независимом от времени гамильтониане H состояние системы меняется в соответствии с уравнением Шредингера, поэтому в некоторый момент времени для статистического оператора $\rho(t)$ справедливо:

$$\rho(t) = \sum_j w_j |j(t)\rangle \langle j(t)|. \quad (2.117)$$

Покажите, как будет меняться при этом среднее значение оператора A

$$\langle A \rangle = \text{Sp}(\rho A) = \text{Sp}(f_A(\rho)),$$

где $f_A(\rho)$ — некоторая функция оператора ρ .

Решение. Будем использовать систему единиц с $\hbar = 1$.

При независимом от времени гамильтониане в системе отсутствуют переходы между различными состояниями, поэтому вероятности w_j остаются постоянными.

Разложим состояние $|j(0)\rangle$ по собственным функциям оператора H , определяемым уравнением:

$$H |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle.$$

Вследствие полноты системы функций имеем

$$|j(0)\rangle = \sum_n |E_n\rangle \langle E_n | j(0)\rangle. \quad (2.118)$$

В результате с помощью уравнения Шредингера для $|j(t)\rangle$ получаем

$$|j(t)\rangle = \sum_n |E_n\rangle e^{-iE_n t} \langle E_n | j(0)\rangle. \quad (2.119)$$

Это выражение можно переписать в виде

$$|j(t)\rangle = \sum_n e^{-iHt} |E_n\rangle \langle E_n | j(0)\rangle = e^{-iHt} |j(0)\rangle. \quad (2.120)$$

Теперь для оператора плотности $\rho(t)$, определяемого формулой (2.117), имеем:

$$\rho(t) = \sum_j w_j e^{-iHt} |j(0)\rangle \langle j(0)| e^{iHt} = e^{-iHt} \rho(0) e^{iHt}. \quad (2.121)$$

С помощью этого соотношения находим

$$\text{Sp} \rho^n(t) = \text{Sp}(e^{-iHt} \rho^n(0) e^{iHt}) = \text{Sp} \rho^n(0), \quad (2.122)$$

где использовано свойство циклической перестановки операторов под знаком *Spur*: $\text{Sp}(ABC) = \text{Sp}(CAB)$.

Таким образом, $\text{Sp } \rho^n$ не меняется со временем; следовательно, это же справедливо и для $\text{Sp } f(\rho)$, где f — любая функция.

25. Найдите статистическую сумму для классического идеального газа, окружающего планету массы M с радиусом R .

Решение. Решение задачи сводится к нахождению конфигурационного интеграла. Поскольку потенциальная энергия $E_{\text{п}}$ отдельной молекулы в гравитационном поле планеты равна

$$E_{\text{п}} = -\gamma \frac{mM}{r}, \quad R \leq r < \infty, \quad (2.123)$$

то конфигурационный интеграл определяется выражением

$$Z(T) = \int_R^{\infty} \exp\left(\gamma \frac{mM}{rkT}\right) 4\pi r^2 dr. \quad (2.124)$$

Интеграл в правой части (2.124) расходится, что означает, что состояние термодинамического равновесия для рассматриваемой системы невозможно.

Задачи для самостоятельного решения

26. Используя выражение для максвелловской функции распределения классического идеального газа, определить среднее значение n -й степени модуля скорости молекул.

27. Используя выражение для функции распределения по координатам, найти среднее значение квадрата дипольного момента единицы объема газа, рассмотренного в задаче 2.11.

28. Определить плотность состояний электронного газа в квантующем магнитном поле, учитывая спиновое расщепление энергетических уровней.

РАВНОВЕСНАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА КВАНТОВЫХ ГАЗОВ

§ 3.1. Ферми- и бозе-газы

При рассмотрении квантовых систем, в которых определены одночастичные состояния, удобно с самого начала учесть симметрию волновой функции системы: частицы с полуцелым спином (фермионы) описываются антисимметричными волновыми функциями, частицы с целым спином (бозоны) — симметричными. Для фермионов справедлив принцип Паули: в каждом квантовом состоянии может находиться не более одной частицы. Для бозонов числа заполнения N_λ квантовых состояний произвольны.

Функции распределения для фермионов и бозонов легко получить в рамках большого канонического ансамбля, выбрав в качестве подсистемы совокупность всех частиц, находящихся в данном квантовом состоянии λ . Энергия системы в этом состоянии есть $E_\lambda = \varepsilon_\lambda N_\lambda$. Выражение для термодинамического потенциала Ω_λ имеет вид

$$\Omega_\lambda = -kT \ln \sum_{N_\lambda} \exp \left[\frac{(\mu - \varepsilon_\lambda) N_\lambda}{kT} \right].$$

Для фермионов $N_\lambda = 0, 1$; поэтому

$$\Omega_\lambda = -kT \ln \left(1 + \exp \left[\frac{(\mu - \varepsilon_\lambda)}{kT} \right] \right). \quad (3.1)$$

Для бозонов $N_\lambda = 0, 1, 2, \dots$. Находя сумму бесконечной геометрической прогрессии, получаем

$$\Omega_\lambda = kT \ln \left(1 - \exp \left[\frac{(\mu - \varepsilon_\lambda)}{kT} \right] \right), \quad (3.2)$$

причем $\mu < 0$. Средние числа заполнения (или функции распределения) получаются с помощью термодинамического равенства

$$\langle N_\lambda \rangle \equiv f(\varepsilon_\lambda) = - \left(\frac{\partial \Omega_\lambda}{\partial \mu} \right)_{T, V}.$$

Поэтому с помощью (3.1) и (3.2) имеем

$$f(\varepsilon_\lambda) = \frac{1}{\exp \left[\frac{\varepsilon_\lambda - \mu}{kT} \right] \pm 1}. \quad (3.3)$$

Верхний знак относится к фермионам, а нижний — к бозонам. Химический потенциал μ определяется из условия нормировки функций распределения:

$$\sum_\lambda \frac{1}{\exp \left[\frac{\varepsilon_\lambda - \mu}{kT} \right] \pm 1} = N, \quad (3.4)$$

где N — полное число частиц в системе. Вводя плотность состояний $\rho(\varepsilon)$, можно переписать равенство (3.4) в виде

$$N = \int d\varepsilon \rho(\varepsilon) f(\varepsilon). \quad (3.5)$$

Термодинамический потенциал всей системы Ω дается формулой

$$\Omega = \sum_\lambda \Omega_\lambda = \mp kT \sum_\lambda \ln \left\{ 1 \pm \exp \left(\frac{\mu - \varepsilon_\lambda}{kT} \right) \right\}, \quad (3.6)$$

которую аналогично (3.5) можно записать так:

$$\Omega = \mp kT \int d\varepsilon \rho(\varepsilon) \ln \left\{ 1 \pm \exp \left(\frac{\mu - \varepsilon}{kT} \right) \right\}. \quad (3.7)$$

Термодинамические характеристики системы определяются с помощью Ω по обычным формулам термодинамики.

Статистические свойства фермионов и бозонов резко различаются при низких температурах. При расчете низкотемпературных свойств фермионов используются асимптотические разложения интегралов

$$\int_0^\infty \frac{d\varepsilon^\varphi(\varepsilon)}{\exp \left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT} \right) + 1} = \int_0^\mu d\varepsilon \varphi(\varepsilon) + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \varphi'(\mu) + \dots \quad (3.8)$$

При произвольных температурах удобно использовать интегралы Ферми—Дирака:

$$F_k(\eta) = \frac{1}{\Gamma(k+1)} \int_0^{\infty} \frac{dx x^k}{1 + \exp(x - \eta)}, \quad \Gamma(z) = \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^{z-1}. \quad (3.9)$$

Интегралы Ферми—Дирака обладают удобным свойством

$$F'_k(\eta) = F_{k-1}(\eta). \quad (3.10)$$

При рассмотрении свойств бозе-систем при температурах, меньших точки T_0 бозе-эйнштейновской конденсации, удобно использовать соотношение

$$\int_0^{\infty} \frac{dx x^{z-1}}{e^x - 1} = \Gamma(z) \zeta(z) \quad (z > 1),$$

где $\Gamma(z)$ — гамма-функция, а $\zeta(z)$ — дзета-функция Римана

$$\zeta(z) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-z}.$$

§ 3.2. Смешанное представление в квантовой статистической механике

Переход к смешанному представлению осуществляется следующим образом. В матрице плотности, взятой в координатном представлении, совершается переход к новым пространственным переменным, равным полусумме и разности старых переменных. Для одночастичной матрицы плотности такому переходу соответствуют соотношения:

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2,$$

$$\langle \mathbf{r}_1, \sigma_1 | \rho | \mathbf{r}_2, \sigma_2 \rangle \rightarrow \left\langle \mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, \sigma_1 \left| \rho \right| \mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}, \sigma_2 \right\rangle.$$

Здесь σ_1 и σ_2 — спиновые переменные. Далее совершается преобразование Фурье по переменной \mathbf{r} :

$$f_{\sigma_1 \sigma_2}(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = \int d\mathbf{r} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}\right) \left\langle \mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, \sigma_1 \left| \rho \right| \mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}, \sigma_2 \right\rangle. \quad (3.11)$$

Функция $f_{\sigma_1\sigma_2}(\mathbf{p}, \mathbf{R})$ называется равновесной квантовой функцией распределения Вигнера. Формула обратного преобразования имеет вид

$$\langle \mathbf{r}_1, \sigma_1 | \rho | \mathbf{r}_2, \sigma_2 \rangle = \int \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \right] f_{\sigma_1\sigma_2} \left(\mathbf{p}, \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right).$$

В общем случае квантовая функция распределения Вигнера не является положительно определенной и поэтому не может рассматриваться как вероятность реализации определенных состояний. Однако проинтегрированная по импульсной переменной функция распределения Вигнера дает распределение по пространственным координатам. Проинтегрированная по пространственной переменной, она дает распределение по импульсу.

Функция распределения Вигнера позволяет записать основные соотношения квантовой статистической механики в виде, формально аналогичном соотношениям классической статистики. Это не относится к спиновым переменным, для которых нет классического аналога.

Все фигурирующие величины в смешанном представлении остаются матрицами в спиновом пространстве. Спиновые индексы при использовании функции распределения Вигнера обычно в явном виде не выписываются.

Задачи

1. Найти термодинамический потенциал Ω для нерелятивистского квантового газа при произвольной температуре. Выразите его для ферми-газа через интеграл Ферми—Дирака.

Решение. Используя формулу (3.7) и выражение (2.86) для плотности состояний

$$\rho(\varepsilon) = \frac{V 2^{\frac{1}{2}} m^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}}}{\pi^2 \hbar^3},$$

получим

$$\Omega = \mp kT \frac{V 2^{\frac{1}{2}} m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} d\varepsilon \varepsilon^{\frac{1}{2}} \ln \left(1 \pm \exp \frac{\mu - \varepsilon}{kT} \right). \quad (3.12)$$

Совершая замену переменных и интегрируя по частям, приходим к следующему соотношению:

$$\Omega = \mp kT \frac{V 2^{\frac{3}{2}} m^{\frac{3}{2}} (kT)^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{dx x^{\frac{3}{2}}}{\exp\left(\frac{x - \mu}{kT}\right) \pm 1}. \quad (3.13)$$

Используя определение интеграла Ферми—Дирака (3.9), этому выражению можно для ферми-газа придать вид

$$\Omega = -\frac{V m^{\frac{3}{2}}}{2^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{3}{2}} \hbar^3} (kT)^{\frac{5}{2}} F_{\frac{3}{2}}\left(\frac{\mu}{kT}\right). \quad (3.14)$$

Уравнение для определения химического потенциала ферми-газа μ с помощью (3.14) записывается следующим образом:

$$N = \frac{V m^{\frac{3}{2}}}{2^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{3}{2}} \hbar^3} (kT)^{\frac{3}{2}} F_{\frac{1}{2}}\left(\frac{\mu}{kT}\right).$$

2. Покажите, что для свободного нерелятивистского квантового газа термодинамический потенциал Ω связан со средним значением E энергии системы соотношением

$$\Omega = -\frac{2}{n} E, \quad (3.15)$$

где n — размерность пространства, в котором движутся молекулы газа.

Решение. Для трехмерного пространства ($n = 3$) выражение для Ω дается формулой (3.12), а для среднего значения энергии E справедливо выражение

$$E = \int_0^{\infty} \varepsilon \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon.$$

Используя формулу (2.86) для плотности состояния $\rho(\varepsilon)$, нетрудно привести это выражение к виду

$$\Omega = -\frac{2}{3} E,$$

что соответствует (3.15) при $n = 3$.

Вычисления для случаев $n = 2$, $n = 1$ удобно провести, используя общую формулу (2.84) для плотности состояний. Например, для $n = 2$ имеем:

$$\Omega = \mp kT \int_0^{\infty} \sum_{\sigma, p_x, p_y} \delta \left(\varepsilon - \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} \right) \ln \left(1 \pm \exp \frac{\mu - \varepsilon}{kT} \right) d\varepsilon.$$

Выполняя суммирование по спиновой переменной, переходя от суммирования по p_x и p_y к интегрированию и вычисляя интегралы по импульсам, приходим после интегрирования по частям по энергетической переменной ε к выражению, которое только знаком отличается от результата вычисления E по формуле

$$E = \int_0^{\infty} \varepsilon f(\varepsilon) \sum_{\sigma, p_x, p_y} \delta \left(\varepsilon - \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} \right) d\varepsilon.$$

Поэтому для $n = 2$ выражение (3.15) также верно.

Аналогичные вычисления по формуле

$$\Omega = \mp kT \int_0^{\infty} \sum_{\sigma, p_x} \delta \left(\varepsilon - \frac{p_x^2}{2m} \right) \ln \left(1 \pm \exp \frac{\mu - \varepsilon}{kT} \right) d\varepsilon$$

приводят при $n = 1$ к равенству

$$\Omega = -2E.$$

Таким образом, соотношение (3.15) справедливо во всех трех случаях.

3. Найти теплоемкость C_V при постоянном объеме нерелятивистского ферми-газа с законом дисперсии $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$ при низких температурах.

Решение. Искомую теплоемкость можно определять с помощью соотношения

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V. \quad (3.16)$$

Выражение для энергии E системы можно записать в виде

$$E = \int_0^{\infty} d\varepsilon \varepsilon \rho(\varepsilon) f(\varepsilon).$$

Используя низкотемпературное разложение (3.8), можно написать с точностью до квадратичных по температуре членов

$$E = \int_0^{\mu} d\varepsilon \varepsilon \rho(\varepsilon) + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 [\rho(\mu) + \mu \rho'(\mu)]. \quad (3.17)$$

В выражении (3.17) химический потенциал μ зависит от температуры, поэтому при вычислении теплоемкости по формуле (3.16) необходимо учесть эту зависимость. Проще всего это сделать следующим образом. Запишем первое слагаемое в правой части (3.17) так:

$$\int_0^{\mu} d\varepsilon \varepsilon \rho(\varepsilon) = \int_0^{\mu_0} d\varepsilon \varepsilon \rho(\varepsilon) + (\mu - \mu_0) \mu_0 \rho(\mu_0),$$

где μ — энергия Ферми. Второе слагаемое в правой части этого выражения представляет собой зависящую от температуры поправку; поэтому значение подынтегральной функции $\varepsilon \rho(\varepsilon)$ можно взять в крайней точке промежутка $[\mu_0, \mu]$. Теперь все выражение (3.17) запишется так:

$$E = \int_0^{\mu_0} d\varepsilon \varepsilon \rho(\varepsilon) + (\mu - \mu_0) \mu_0 \rho(\mu_0) + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 [\rho(\mu_0) + \mu_0 \rho'(\mu_0)]. \quad (3.18)$$

Запишем выражение для среднего числа N частиц системы и преобразуем его аналогичным образом:

$$N = \int_0^{\infty} d\varepsilon \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) = \int_0^{\mu_0} d\varepsilon \rho(\varepsilon) + (\mu - \mu_0) \rho(\mu_0) + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \rho'(\mu_0).$$

Первое слагаемое в правой части равно N , ибо оно представляет собой выражение для числа частиц N системы при нулевой температуре. Поэтому

$$(\mu - \mu_0) \rho(\mu_0) + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \rho'(\mu_0) = 0. \quad (3.19)$$

С учетом (3.19) равенство (3.18) переписывается в виде

$$E = \int_0^{\mu_0} d\varepsilon \varepsilon \rho(\varepsilon) + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \rho(\mu_0). \quad (3.20)$$

Теперь для теплоемкости C_V получаем

$$C_V = \frac{\pi^2}{3} k^2 \rho(\mu_0) T. \quad (3.21)$$

Видно, что значение теплоемкости определяется плотностью состояний на уровне Ферми.

4. Используя известное соотношение квантовой статистической механики $\Omega = -\frac{2}{3}E$, можно провести вычисление теплоемкости C_V ферми-газа при постоянном объеме следующим образом. Найдем энтропию системы S , для которой справедливо равенство

$$S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T} = \frac{2}{3} \frac{\partial E}{\partial T}.$$

С помощью приближения (3.20) для энергии E , найденного в предыдущей задаче, получим для S выражение

$$S = \frac{2}{3} \frac{\pi^2}{3} k^2 \rho(\mu_0) T.$$

Теперь для теплоемкости C_V находим

$$C_V = T \frac{\partial S}{\partial T} = \frac{2}{3} \frac{\pi^2}{3} k^2 \rho(\mu_0) T.$$

Как согласовать этот результат с формулой (3.21) предыдущей задачи?

Решение. Формула для энтропии $S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T}$ предполагает выполнение дифференцирования при фиксированном химическом потенциале системы μ :

$$S = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right)_\mu.$$

Поэтому, используя результаты предыдущей задачи, следует дифференцировать не выражение (3.20), а выражение (3.17), содержащее химический потенциал μ при конечной температуре T , а не при $T = 0$. Тогда получим

$$S = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right)_\mu = \frac{2}{3} \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_\mu = \frac{2}{3} \frac{\pi^2}{3} k^2 [\rho(\mu) + \mu \rho'(\mu)] T. \quad (3.22)$$

Для нерелятивистского газа плотность состояний $\rho(\varepsilon)$ пропорциональна $\varepsilon^{1/2}$:

$$\rho(\varepsilon) = A\varepsilon^{1/2}.$$

Поэтому справедливо равенство

$$\rho(\mu) + \mu\rho'(\mu) = \frac{3}{2}\rho(\mu).$$

Подставляя это соотношение в (3.22) и учитывая, что μ можно положить равным энергии Ферми μ_0 , приходим с помощью выражения для теплоемкости $C_V = T \frac{\partial S}{\partial T}$ к правильному результату:

$$C_V = \frac{\pi^2}{3} k^2 \rho(\mu_0) T.$$

5. В зонной теории собственных полупроводников и полуметаллов термодинамический потенциал Ω электронной системы дается выражением

$$\Omega = -kT \sum_i \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \rho_i(\varepsilon) \ln \left(1 + \exp \frac{\mu - \varepsilon}{kT} \right), \quad (3.23)$$

где суммирование производится по электронным зонам. Рассматривая приближение двух зон — валентной зоны u и зоны проводимости c , выяснить, как запишется термодинамический потенциал Ω после перехода к «дырочному» представлению, когда вместо электронов в валентной зоне рассматриваются положительно заряженные дырки.

Решение. Рассмотрим для определенности случай собственного полуметалла, зонная схема которого показана на рис. 3.1. Энергию отсчитываем от дна зоны проводимости; перекрытие зон равно Δ . В случае полупроводника $\Delta < 0$ — это ширина запрещенной зоны. Будем считать валентную зону ограниченной снизу значением энергии $\varepsilon = -\delta$, хотя в приближении только двух зон в конечных результатах следует положить $\delta \rightarrow \infty$.

Вводим число состояний $N_i(\varepsilon)$ в i -й зоне с энергией, не превосходящей ε , так что

$$\rho_i(\varepsilon) = \frac{dN_i(\varepsilon)}{d\varepsilon}, \quad (i = v, c). \quad (3.24)$$

Тогда, интегрируя (3.23) по частям, получаем

$$\Omega = - \int_0^{\infty} \frac{d\varepsilon N_c(\varepsilon)}{1 + \exp \frac{\varepsilon - \mu}{kT}} - \int_{-\delta}^{\Delta} \frac{d\varepsilon N_v(\varepsilon)}{1 + \exp \frac{\varepsilon - \mu}{kT}} -$$

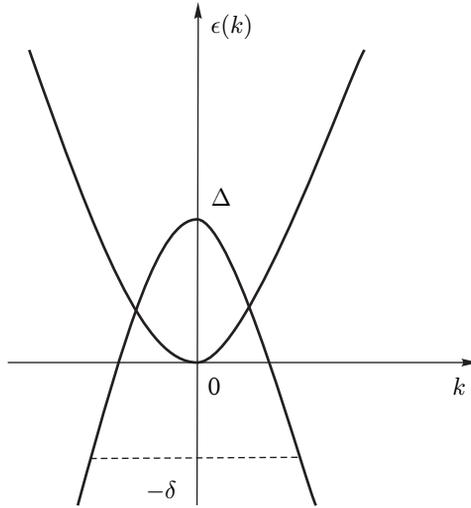


Рис. 3.1

$$-kT N_v(\varepsilon) \ln \left(1 + \exp \frac{\mu - \varepsilon}{kT} \right) \Big|_{-\delta}^{\Delta}. \quad (3.25)$$

Вводим величину

$$N_h^v = N - N_v(\varepsilon), \quad (3.26)$$

где N — число электронов в целиком заполненной валентной зоне, равное полному числу электронов в собственном полуметалле в модели двух зон: $N_v(\Delta) = N$. Последнее слагаемое в (3.25) на нижнем пределе интегрирования обращается в нуль; поэтому с учетом (3.26) выражение (3.25) записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \Omega = & - \int_0^{\infty} \frac{d\varepsilon N_c(\varepsilon)}{1 + \exp \frac{\varepsilon - \mu}{kT}} - \int_{-\delta}^{\Delta} \frac{d\varepsilon N_h^v(\varepsilon)}{1 + \exp \frac{\varepsilon - \mu}{kT}} - \\ & - N \int_{-\delta}^{\Delta} \frac{d\varepsilon}{1 + \exp \frac{\varepsilon - \mu}{kT}} - NkT \ln \left(1 + \exp \frac{\mu - \Delta}{kT} \right). \quad (3.27) \end{aligned}$$

Переходим к дырочному представлению. Делаем замену $\varepsilon' = \Delta - \varepsilon$, вводим $\mu_h = \Delta - \mu$ и определяем число дырочных состояний с энергией, меньшей ε : $N_h(\varepsilon) = N_h^v(\Delta - \varepsilon)$. Тогда второе слагае-

мое в (3.27) принимает вид

$$\int_{-\delta}^{\Delta} \frac{d\varepsilon N_h^v(\varepsilon)}{1 + \exp \frac{\varepsilon - \mu}{kT}} = \int_0^{\Delta + \delta} \frac{d\varepsilon N_h(\varepsilon)}{1 + \exp \frac{\mu_h - \varepsilon}{kT}}.$$

Учитывая равенство

$$\left(1 + \exp \frac{\mu_h - \varepsilon}{kT}\right)^{-1} = 1 - \left(1 + \exp \frac{\varepsilon - \mu_h}{kT}\right)^{-1},$$

используя (3.27) и вычисляя интеграл в третьем слагаемом в (3.27), перепишем (3.27) следующим образом:

$$\begin{aligned} \Omega = & - \int_0^{\infty} \frac{d\varepsilon N_c(\varepsilon)}{1 + \exp \frac{\varepsilon - \mu}{kT}} - \int_0^{\Delta + \delta} \frac{d\varepsilon N_h(\varepsilon)}{1 + \exp \frac{\varepsilon - \mu_h}{kT}} + \\ & + \int_0^{\Delta + \delta} d\varepsilon N_h(\varepsilon) - NkT \ln \left(1 + \exp \frac{\mu + \delta}{kT}\right). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Третье слагаемое в этом выражении является постоянной величиной и может быть отброшено. Учитывая необходимость предельного перехода $\delta \rightarrow \infty$ в модели двух зон, можно переписать последнее слагаемое в (3.28) в виде

$$NkT \ln \left(1 + \exp \frac{\mu + \delta}{kT}\right) \rightarrow N(\mu + \delta).$$

Слагаемое $N\delta$, являющееся постоянной величиной, можно отбросить. Теперь видно, что выражение (3.28) для термодинамического потенциала Ω электронной системы кристалла приобретает структуру

$$\Omega = \Omega_e + \Omega_h - \mu N, \quad (3.29)$$

где Ω_e и Ω_h , определяемые первым и вторым слагаемыми в (3.28), имеют смысл потенциалов электронов проводимости и дырок соответственно. Соотношение (3.29) удовлетворяет условию сохранения полного числа электронов в системе. Действительно, определяя число электронов N в системе по обычной формуле $N = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}$ и учитывая, что $\frac{\partial}{\partial \mu} = -\frac{\partial}{\partial \mu_h}$, получаем из (3.29) выражение

$$N = N_e - N_h + N, \quad (3.30)$$

где N_e и N_h — числа электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне. Например, дифференцируя по μ первое слагаемое в (3.28), имеем

$$\begin{aligned} - \int_0^{\infty} d\varepsilon N_c(\varepsilon) \frac{\partial}{\partial \mu} \left(1 + \exp \frac{\varepsilon - \mu}{kT} \right)^{-1} &= \\ &= \int_0^{\infty} d\varepsilon N_c(\varepsilon) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(1 + \exp \frac{\varepsilon - \mu}{kT} \right)^{-1} \equiv I. \end{aligned}$$

Интегрируя теперь по частям и учитывая (3.24), получаем

$$I = \int_0^{\infty} d\varepsilon \rho_c(\varepsilon) \left(1 + \exp \frac{\varepsilon - \mu}{kT} \right)^{-1} = N_e.$$

В собственном полуметалле $N_e = N_h$ в соответствии с формулой (3.30). Вычисление других термодинамических характеристик производится дифференцированием термодинамического потенциала Ω при фиксированном значении химического потенциала μ , так что последнее слагаемое в (3.29) не будет давать вклада. Итак, если при расчетах явно учитывать условие $N_e = N_h$, то последнее слагаемое в (3.29) можно отбросить и записать термодинамический потенциал в виде

$$\Omega = \Omega_e + \Omega_h, \quad \text{причем} \quad \frac{\partial \Omega_e}{\partial \mu} = \frac{\partial \Omega_h}{\partial \mu}.$$

6. Найти термодинамический потенциал Ω для нерелятивистского электронного газа в квантующем магнитном поле при произвольной температуре. Получить выражения для энтропии системы S , магнитного момента M и среднего числа частиц N .

Решение. Используя общее выражение (3.7) для термодинамического потенциала ферми-системы и формулу (2.88) для плотности состояний $\rho(\varepsilon)$ в квантующем магнитном поле

$$\rho(\varepsilon) = \frac{Vm^{\frac{3}{2}}\omega_c}{2^{\frac{1}{2}}\pi^2\hbar^2} \sum_n \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)}} \equiv A \sum_n \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)}},$$

получим

$$\Omega = -kTA \int_0^{\infty} d\varepsilon \sum_n \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)}} \ln \left(1 + \exp \frac{\mu - \varepsilon}{kT}\right).$$

Суммирование проводится по таким значениям $n = 0, 1, 2, \dots$, при которых подынтегральное выражение вещественно. Меняя порядок интегрирования и суммирования и выполняя интегрирование по частям, приведем это выражение к виду

$$\Omega = -2A \sum_{n=0}^{\infty} \int_{\hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)}^{\infty} d\varepsilon \sqrt{\varepsilon - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)} \left(1 + \exp \frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right)^{-1}. \quad (3.31)$$

Здесь суммирование по n , как легко убедиться, осуществляется в указанных пределах. Совершая замену переменных $\varepsilon - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right) = kTx$, переписываем (3.31) следующим образом:

$$\Omega = -2A (kT)^{\frac{3}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dx x^{\frac{1}{2}} \left\{ 1 + \exp \left[x - \frac{\mu - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)}{kT} \right] \right\}^{-1}.$$

Используя определение (3.9) интеграла Ферми—Дирака и подставляя значение A , получим

$$\Omega = -\frac{Vm^{\frac{3}{2}}\omega_c (kT)^{\frac{3}{2}}}{2^{\frac{1}{2}}\pi^{\frac{3}{2}}\hbar^2} \sum_{n=0}^{\infty} F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)}{kT} \right). \quad (3.32)$$

С помощью термодинамического равенства

$$d\Omega = -SdT - Nd\mu - MdB$$

находим

$$S = -\frac{3\Omega}{2T} - A(\pi k)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{T^{\frac{1}{2}}} \sum_{n=0}^{\infty} F_{-\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)}{kT} \right) \times \\ \times \left[\mu - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right) \right],$$

$$M = -\frac{e}{mc} \frac{\Omega}{\omega_c} - A \frac{e\hbar}{mc} (\pi kT)^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} F_{-\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)}{kT} \right) \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (3.33)$$

$$N = A (\pi kT)^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} F_{-\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)}{kT} \right).$$

Теперь, используя полученные формулы, можно убедиться в справедливости равенства

$$\frac{5}{2}\Omega + TS + \mu N + MB = 0. \quad (3.34)$$

Это соотношение является аналогом хорошо известного равенства квантовой статистической механики (см. задачу №2)

$$\Omega = -\frac{2}{3}E,$$

справедливого в отсутствие внешних полей. Действительно, запишем энергию системы E как сумму энергии магнитного момента в поле, равную $-MB$, и оставшейся части \tilde{E} , которая, очевидно, представляет собой энергию хаотического движения частиц при наличии магнитного поля:

$$E = \tilde{E} - MB. \quad (3.35)$$

Используя термодинамическое определение потенциала

$$\Omega = E - TS - \mu N \quad (3.36)$$

и равенство (3.35), с помощью формулы (3.34) получаем

$$\Omega = -\frac{2}{3}\tilde{E}.$$

Подчеркнем, что при наличии внешнего магнитного поля средняя энергия хаотического движения зависит от магнитного поля. Отметим, что соотношение (3.34) остается справедливым и при учете спинового расщепления энергетических уровней в магнитном поле.

7. Показать, что средняя энергия \tilde{E} хаотического движения частиц в квантующем магнитном поле делится поровну между тремя поступательными степенями свободы.

Решение. Вычислим средние значения энергии поперечного и продольного движения в магнитном поле:

$$E_{\perp} = \left\langle \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \right\rangle, \quad E_{\parallel} = \left\langle \frac{p_z^2}{2m} \right\rangle.$$

Выражение для E_{\perp} можно записать непосредственно с помощью соотношения (3.4):

$$E_{\perp} = \sum_{\sigma, n, p_y, p_z} \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \left\{ 1 + \exp \frac{\frac{p_z^2}{2m} + \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) - \mu}{kT} \right\}^{-1}. \quad (3.37)$$

Действуя так же, как и в задаче 2.21, посвященной вычислению плотности состояний в квантующем магнитном поле, приведем это выражение к виду

$$E_{\perp} = \frac{Vm\omega_c^2}{\pi^2\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2} \right) \int_0^{\infty} dp_z \left\{ 1 + \exp \frac{\frac{p_z^2}{2m} + \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) - \mu}{kT} \right\}^{-1}.$$

Совершая замену переменной $p_z^2 = 2mkTx$ и учитывая определение интегралов Ферми—Дирака (3.9), получим

$$E_{\perp} = \frac{Vm^{\frac{3}{2}}\omega_c^2}{2^{\frac{1}{2}}\pi^{\frac{3}{2}}\hbar} (kT)^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} F_{-\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)}{kT} \right) \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Выражение для энергии продольного движения E_{\parallel} можно записать в виде

$$E_{\parallel} = \sum_{\sigma, n, p_y, p_z} \frac{p_z^2}{2m} \left\{ 1 + \exp \frac{\frac{p_z^2}{2m} + \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) - \mu}{kT} \right\}^{-1}.$$

Преобразуем это соотношение аналогично (3.37). Получим

$$\begin{aligned} E_{\parallel} &= \frac{V\omega_c}{2\pi^2\hbar^2} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dp_z p_z^2 \left\{ 1 + \exp \frac{\frac{p_z^2}{2m} + \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) - \mu}{kT} \right\}^{-1} = \\ &= \frac{Vm^{\frac{3}{2}}\omega_c}{2^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{3}{2}}\hbar^2} (kT)^{\frac{3}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)}{kT} \right). \end{aligned}$$

Используя полученные выражения для E_{\perp} и E_{\parallel} и выражение (3.33) для магнитного момента M в квантующем магнитном поле, убеждаемся в справедливости равенства

$$MB = 2E_{\parallel} - E_{\perp}. \quad (3.38)$$

Но это равенство как раз и означает, что средняя энергия хаотического движения \bar{E} поделена поровну между всеми тремя поступательными степенями свободы. Действительно, энергию системы E можно представить в двух видах:

$$E = E_{\perp} + E_{\parallel} = \tilde{E} - MB.$$

Но равенство (3.38) можно получить отсюда только при выполнении условия

$$\tilde{E} = 3E_{\parallel}.$$

8. Показать, что термодинамический потенциал Ω электронного газа в квантующем магнитном поле, даваемый формулой (3.32), переходит в обычное выражение в отсутствие магнитного поля при $\omega_c \rightarrow 0$.

Решение. Записав выражение для термодинамического потенциала Ω в квантующем магнитном поле в виде

$$\Omega = -\frac{Vm^{\frac{3}{2}}\omega_c(kT)^{\frac{3}{2}}}{2^{\frac{1}{2}}\pi^{\frac{3}{2}}\hbar^2} \sum_{n=0}^{\infty} F_{\frac{1}{2}}\left(\frac{\mu - \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)}{kT}\right), \quad (3.39)$$

перейдем от суммирования по n к интегрированию по непрерывной переменной x . Прибавляемая к n величина $\frac{1}{2}$ меньше самого n , и поэтому она отбрасывается при переходе от суммирования к интегрированию. Учитывая свойство интегралов Ферми—Дирака (3.10), получаем

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} F_{\frac{1}{2}}\left(\frac{\mu - \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)}{kT}\right) &\rightarrow \int_0^{\infty} dx F_{\frac{1}{2}}\left(\frac{\mu - \hbar\omega_c x}{kT}\right) = \\ &= -\frac{kT}{\hbar\omega_c} F_{\frac{3}{2}}\left(\frac{\mu - \hbar\omega_c x}{kT}\right)\Bigg|_0^{\infty}. \end{aligned} \quad (3.40)$$

На верхнем пределе это выражение в силу определения (3.9) обращается в нуль. Действительно,

$$F_k(\eta) = \frac{1}{\Gamma(k+1)} \int_0^\infty \frac{dx x^k}{1 + \exp(x - \eta)} \xrightarrow{\eta \rightarrow \infty} \\ \xrightarrow{\eta \rightarrow \infty} \frac{1}{\Gamma(k+1)} e^\eta \int_0^\infty dx e^{-x} x^k = e^\eta \xrightarrow{\eta \rightarrow \infty} 0.$$

Подставляя значение функции (3.40) в соотношение (3.39), приходим к выражению для Ω :

$$\Omega = -\frac{Vm^{\frac{3}{2}}}{2^{\frac{1}{2}}\pi^{\frac{3}{2}}\hbar^3} (kT)^{\frac{5}{2}} F_{\frac{3}{2}}\left(\frac{\mu}{kT}\right).$$

9. Показать, что магнитный момент M системы в квантующем магнитном поле (3.33) пропадает при выключении магнитного поля.

Решение. Прежде всего отметим, что первое слагаемое в правой части формулы (3.33) при $\omega_c \rightarrow 0$ расходится как $\frac{1}{\omega_c}$, поскольку термодинамический потенциал Ω , как было выяснено в предыдущей задаче, стремится при $\omega_c \rightarrow 0$ к конечному пределу:

$$-\frac{e}{mc} \frac{\Omega}{\omega_c} \rightarrow -\frac{e}{mc} \frac{\Omega(\omega_c = 0)}{\omega_c}.$$

Очевидно, что второе слагаемое в правой части выражения (3.33) должно стремиться к такому же пределу, взятому с противоположным знаком. Убедимся, что именно так и происходит:

$$-A \frac{e\pi^{\frac{1}{2}}\hbar}{mc} (kT)^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2}\right) F_{-\frac{1}{2}}\left(\frac{\mu - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)}{kT}\right) \rightarrow \\ \rightarrow -\frac{Vm^{\frac{3}{2}}\omega_c}{2^{\frac{1}{2}}\pi^{\frac{3}{2}}\hbar} \frac{e}{mc} (kT)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty dx x F_{-\frac{1}{2}}\left(\frac{\mu - \hbar\omega_c x}{kT}\right) = \frac{e}{mc} \frac{\Omega(\omega_c = 0)}{\omega_c}.$$

Итак, мы показали, что $M \xrightarrow{\omega_c \rightarrow 0} 0$.

10. Найдите термодинамический потенциал Ω большого канонического ансамбля для электронной системы тонкой металли-

ческой пленки в условиях квантового размерного эффекта, когда одночастичный энергетический спектр имеет вид

$$\varepsilon_{n,\mathbf{p},\sigma} = \frac{\mathbf{p}}{2m} + \varepsilon_n, \quad (3.41)$$

где \mathbf{p} — двумерный импульс движения параллельно плоскости пленки, σ — спиновое квантовое число, ε_n — квантованная энергия движения поперек пленки в ее потенциальном поле, вид которого не конкретизируется. Получите выражение для энтропии S и среднего числа частиц N .

Решение. Для вычисления Ω найдем плотность состояний $\rho(\varepsilon)$ электронов в пленке. Исходя из общего выражения (2.84), имеем

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{n,\mathbf{p},\sigma} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{n,\mathbf{p},\sigma}). \quad (3.42)$$

Переходя по обычному правилу от суммирования к интегрированию по двумерной импульсной переменной и выполняя суммирование по спину, получим

$$\rho(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2\hbar^2L} \sum_n \int d\mathbf{p} \delta\left(\varepsilon - \varepsilon_n - \frac{p^2}{2m}\right), \quad (3.43)$$

Где V — объем, а L — ее толщина. Вычисляя интеграл в полярных координатах, находим

$$\rho(\varepsilon) = \frac{Vm}{\pi\hbar^2L} \sum_{n=1}^{n_\varepsilon} 1 = \frac{Vm}{\pi\hbar^2L} n_\varepsilon, \quad (3.44)$$

где $n_\varepsilon = \max\{n | \varepsilon_n \leq \varepsilon\}$.

Вычислим термодинамический потенциал Ω , исходя из общего выражения (3.7). Записав входящую в (3.44) величину n_ε в виде

$$n_\varepsilon = \sum_{n=1}^{\infty} \theta(\varepsilon - \varepsilon_n), \quad (3.45)$$

где $\theta(x)$ — ступенчатая функция Хевисайда, имеем, выражая температуру T в энергетических единицах kT ,

$$\Omega = -T \frac{Vm}{\pi\hbar^2L} \sum_{n=1}^{\infty} \int_{\varepsilon_n}^{\infty} \ln\left(1 + e^{\frac{\mu - \varepsilon}{kT}}\right) d\varepsilon. \quad (3.46)$$

Выполняя в (3.46) интегрирование по частям, приводим выражение (3.46) к виду

$$\Omega = -\frac{VmT^2}{\pi\hbar^2L} \sum_{n=1}^{\infty} F_1(\mu_n), \quad (3.47)$$

где $F_1(\mu_n)$ — интеграл Ферми—Дирака первого порядка, а

$$\mu_n = \frac{\mu - \varepsilon_n}{T}.$$

Для среднего числа частиц в системе N имеем:

$$N = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{T,V} = \frac{VmT}{\pi\hbar^2L} \sum_{n=1}^{\infty} F_0(\mu_n). \quad (3.48)$$

Интеграл Ферми—Дирака нулевого порядка F_0 вычисляется в явном виде:

$$F_0(\eta) = \ln(e^\eta + 1). \quad (3.49)$$

Поэтому выражение (3.48) можно переписать следующим образом:

$$N = \frac{VmT}{\pi\hbar^2L} \ln \prod_{n=1}^{\infty} (\exp \mu_n + 1). \quad (3.50)$$

С помощью (3.47) находим выражение для энтропии S :

$$S = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_{\mu,V} = \frac{VmT}{\pi\hbar^2L} \sum_{n=1}^{\infty} (2F_1(\mu_n) - \mu_n F_0(\mu_n)). \quad (3.51)$$

Сравнивая выражения (3.47), (3.48) и (3.51), убеждаемся в справедливости соотношения

$$TS + \mu N + 2\Omega - E_{\perp} = 0, \quad (3.52)$$

где

$$E_{\perp} = \frac{VmT}{\pi\hbar^2L} \sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon_n F_0(\mu_n) \quad (3.53)$$

представляет собой среднюю энергию движения электронов поперек пленки.

Нетрудно видеть, что соотношение (3.52) представляет собой обобщенные формулы $\Omega = -\frac{2}{3}E$ для рассматриваемого случая. Действительно, (3.52) эквивалентно равенству

$$\Omega = -\frac{2}{3}\tilde{E}, \quad (3.54)$$

где \tilde{E} — средняя кинетическая энергия хаотического теплового движения. Чтобы показать справедливость (3.54), учтем, что

$$E_{\perp} = \frac{\tilde{E}}{3} + V, \quad (3.55)$$

где V — средняя потенциальная энергия электронов в поле пленки. Подставляя в (3.52) термодинамическое определение потенциала Ω

$$\Omega = \tilde{E} + V - TS - \mu N,$$

получим

$$\Omega + \tilde{E} + V - E_{\perp} = 0,$$

откуда с помощью (3.55) немедленно получаем соотношение (3.54).

11. Получите выражение для энергии Ферми электронов ε_F в размерно-квантованной пленке при произвольном выборе модели пленочного потенциала. Рассмотрите случай, когда пленочный потенциал аппроксимируется прямоугольной ямой с бесконечно высокими стенками.

Решение. Введем среднюю плотность состояний, приходящуюся на единицу объема пленки:

$$g(\varepsilon) = \frac{\rho(\varepsilon)}{V}. \quad (3.56)$$

Выбирая систему единиц с $\hbar = c = 1$, имеем с помощью соотношения (3.44)

$$g(\varepsilon) = \frac{mn_{\varepsilon}}{\pi L}. \quad (3.57)$$

Рассмотрим зависимость $g(\varepsilon)$ от толщины пленки L при абсолютном нуле температуры. При увеличении толщины пленки плотность состояний $g(\mu)$ убывает, как $\frac{1}{L}$, пока не меняется число заполненных пленочных подзон. Однако при значении толщины L_n , когда начинает заполняться очередная новая подзона, плотность состояний скачком увеличивается. Значение толщины L_n определяется из уравнения

$$\mu(L_n) = \varepsilon_{n+1}(L_n). \quad (3.58)$$

При абсолютном нуле температуры средняя концентрация $\frac{N}{V}$ электронов определяется соотношением

$$\frac{N}{V} = \int_0^{\mu} g(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (3.59)$$

Отсюда с помощью (3.57) и соотношения (3.45) получаем:

$$\frac{N}{V} = \frac{m}{\pi L} \sum_{n=1}^{n_F} (\mu - \varepsilon_n), \quad (3.60)$$

где n_F — число заполненных при абсолютном нуле температуры пленочных подзон. Разумеется, соотношение (3.60) может быть получено с помощью выражения (3.48). С помощью (3.60) для химического потенциала μ , равного ε_F при $T = 0$, получаем:

$$\mu = \frac{N}{V} \frac{\pi L}{m n_F} + \frac{1}{n_F} \sum_{n=1}^{n_F} \varepsilon_n. \quad (3.61)$$

С помощью соотношений (3.58) и (3.61) получаем выражение для толщины L_n пленки, при которой начинает заполняться $(n + 1)$ -я пленочная подзона:

$$L_n^3 = \frac{\pi V}{12N} n(n + 1)(4n + 5). \quad (3.62)$$

В случае, когда потенциал пленки аппроксимируется прямоугольной ямой с бесконечно высокими стенками, одноэлектронный энергетический спектр имеет вид

$$\varepsilon_n = \frac{\pi^2 n^2}{2mL^2}. \quad (3.63)$$

В этом случае выражение (3.61) для μ оказывается равным

$$\mu = \frac{N}{V} \frac{\pi L}{m n_F} + \frac{\pi^2}{12mL^2} (n_F + 1)(2n_F + 1). \quad (3.64)$$

При заданном значении концентрации электронов в пленке $\frac{N}{V}$ и толщины пленки L входящая в (3.64) величина n_F определяется с помощью соотношения (3.62): если толщина пленки L такова, что $L_{n-1} < L < L_n$, то $n_F = n$. Исследование соотношения (3.64) показывает, что на любом из интервалов изменения

толщины от значения L_{n-1} до L_n химический потенциал имеет минимум, расположенный при

$$L^3 = \frac{\pi V}{6N} n(n+1)(2n+1). \quad (3.65)$$

Осцилляции химического потенциала заметны, когда заполнены лишь несколько подзон в пленке. Осцилляции термодинамических характеристик пленки при изменении ее толщины повторяют плотности состояний на уровне Ферми.

12. Найдите большой термодинамический потенциал Ω , энтропию S и магнитный момент M электронной системы тонкой металлической пленки толщиной L , помещенной в однородное внешнее магнитное поле, перпендикулярное поверхности пленки, в случае, когда квантование движения электронов обусловлено как размерами образца, так и магнитным полем. Спиновым расщеплением энергетических уровней пренебречь, для пленочного потенциала принять модель $V(z) = V_0|z|^k$ и считать, что расстояние между пленочными уровнями много меньше циклотронного кванта.

Решение. Выберем вектор-потенциал \mathbf{A} внешнего магнитного поля в виде $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$. В приближении изотропной эффективной массы гамильтониан электронов в пленке в пренебрежении спином записывается в виде

$$H = \frac{1}{2m} \left[\hat{p}_x^2 + \left(\hat{p}_y - \frac{e}{c} Bx \right)^2 + \hat{p}_z^2 \right] + V(z). \quad (3.66)$$

В уравнении Шредингера разделяются переменные, описывающие движение вдоль и поперек пленки. Энергетический спектр электрона имеет вид

$$\varepsilon_{n,p_y,s,\sigma} = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \varepsilon_s. \quad (3.67)$$

Здесь $\omega_c = eB/mc$ — циклотронная частота электрона, ε_s — энергия движения поперек пленки.

Используем формулу (2.84) для плотности состояний и переходим от суммирования по p_y к интегрированию. Для определения пределов интегрирования учтем, что волновые функции осциллятора Ландау центрированы в точках $x_0 = \frac{p_y}{m\omega_c}$. Если считать доступным для электронов только те состояния, у которых центр осциллятора расположен внутри образца, то возможные

значения x_0 ограничиваются условием $0 \leq x_0 \leq L_x$, что немедленно дает для p_y

$$0 \leq p_y \leq m\omega_c L_x.$$

С учетом этого условия, выполняя суммирование по спиновой переменной, получим

$$\rho(\varepsilon) = \frac{V}{\pi\hbar L} m\omega_c \sum_{n,s} \delta\left(\varepsilon - \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right) - \varepsilon_s\right), \quad (3.68)$$

где V — объем.

Рассмотрим случай, когда основную роль в квантовании движения носителей играет магнитное поле. При этом очевидно неравенство

$$\varepsilon_{s+1} - \varepsilon_s \ll \hbar\omega_c.$$

При выполнении этого условия суммирование по плечным уровням можно заменить интегрированием по ε_S . Тогда вместо (3.66) получим

$$\begin{aligned} \rho(\varepsilon) &= \frac{V}{\pi\hbar L} m\omega_c \sum_n \int d\varepsilon_s \frac{ds}{d\varepsilon_s} \delta\left(E - \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right) - \varepsilon_s\right) = \\ &= \frac{V}{\pi\hbar L} m\omega_c \sum_{n=0}^{n_E} \frac{ds}{d\varepsilon_s} \Bigg|_{\varepsilon_s = E - \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)}, \quad (3.69) \end{aligned}$$

где $n_E = \max\{n | \varepsilon_n \leq \varepsilon\}$. Входящие в (3.69) производные $\frac{ds}{d\varepsilon_S}$ определяются в квазиклассическом приближении. Используя условия квазиклассического квантования

$$\int_{z_1(\varepsilon_s)}^{z_2(\varepsilon_s)} dz \sqrt{2m(\varepsilon_s - V(z))} = \pi s,$$

где z_1 и z_2 — соответственно меньшее и большее из значений z , обращающих в нуль подинтегральное выражение, получим для $\frac{ds}{d\varepsilon_s}$:

$$\frac{ds}{d\varepsilon_s} = \frac{\sqrt{2m}}{2\pi} \int_{z_1}^{z_2} \frac{dz}{\sqrt{\varepsilon_s - V(z)}}. \quad (3.70)$$

Подставляя (3.70) в формулу (3.69), получим

$$\rho(\varepsilon) = \frac{V}{2^{\frac{1}{2}}\pi^2\hbar L} m^{\frac{3}{2}}\omega_c \times \sum_{n=0}^{n_E} \int_{z_1(\varepsilon - \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2}))}^{z_2(\varepsilon - \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2}))} dz \left(\varepsilon - \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right) - V(z)\right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (3.71)$$

В заданной в условии задачи модели для $V(z)$ интеграл в (3.71) сводится к удвоенному интегралу по промежутку от нуля до $z_2 = \left(\varepsilon - \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)\right)^{\frac{1}{k}} V_0^{-\frac{1}{k}}$, поскольку $z_1 = -z_2$. После замены переменной $V_0 z^k = \left(\varepsilon - \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)\right) x$ получим для $\rho(\varepsilon)$:

$$\rho(\varepsilon) = 2^{\frac{1}{2}} \frac{V}{\pi^2\hbar L} \frac{m^{\frac{3}{2}}\omega_c}{kV_0^{\frac{1}{k}}} B\left(\frac{1}{k}, \frac{1}{2}\right) \sum_{n=0}^{n_\varepsilon} \left(\varepsilon - \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)\right)^{\frac{2-k}{2k}}, \quad (3.72)$$

где $B(p, q)$ — бета-функция:

$$B(p, q) = \int_0^1 dx x^{p-1} (1-x)^{q-1}$$

которая выражается через гамма-функции: $B(p, q) = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)}$.

С помощью соотношения (3.72) для плотности состояний термодинамический потенциал получается в виде

$$\Omega = -\frac{V}{\pi^{\frac{3}{2}}\hbar L} \frac{(2m)^{\frac{1}{2}}}{V_0^{\frac{1}{k}}} \frac{eB}{c} \Gamma\left(\frac{k+1}{2k}\right) (kT)^{\frac{3k+2}{2k}} \sum_{n=0}^{\infty} F_{\frac{k+2}{2k}}(\mu_n), \quad (3.73)$$

где $\mu_n = \frac{1}{kT} \left(\mu - \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)\right)$.

Отметим, что $V(z) = V_0|z|^k$ содержит, как частные случаи, широко используемые для оценок модели параболической ямы ($k = 2$) и прямоугольной ямы с бесконечно высокими стенками ($k \rightarrow \infty, V_0 \rightarrow V_0 \left(\frac{2}{L}\right)^k$). Входящий в (3.73) химический потен-

циал μ определяется из условия нормировки:

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, V, B}. \quad (3.74)$$

Энтропия S и магнитный момент M находится с помощью (3.73) по термодинамическим формулам:

$$S = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{\mu, V, B}; \quad M = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial B} \right)_{T, \mu, V}. \quad (3.75)$$

Вычисляя N , S и M по формулам (3.74) и (3.75) с помощью выражения (3.73), убеждаемся в справедливости равенства

$$\frac{5k+2}{2k} \Omega + TS + \mu N + MB = 0. \quad (3.76)$$

Это равенство эквивалентно соотношению $\Omega = -\frac{2}{3} \tilde{E}$, где \tilde{E} — кинетическая энергия хаотического движения электронов. Действительно, подставим в (3.76) термодинамическое определение Ω

$$\Omega = E - TS - \mu N,$$

после чего приходим к равенству

$$\frac{3k+2}{2k} \Omega = -(E + MB). \quad (3.77)$$

Выражение в скобках представляет собой энергию системы за вычетом энергии магнитного момента во внешнем поле. Поэтому правая часть выражения (3.77), равная сумме кинетической энергии хаотического движения E и средней энергии \bar{V} , в потенциальном поле $V(z)$ оказывается равной

$$\frac{3k+2}{2k} \Omega = -(\tilde{E} + \bar{V}).$$

По теореме вириала

$$k\bar{V} = \frac{2}{3} \tilde{E},$$

поэтому последнее равенство переписывается в виде

$$\Omega = -\frac{2}{3} \tilde{E}.$$

13. На основе результатов предыдущей задачи, используя асимптотическое выражение для интегралов Ферми—Дирака при больших значениях аргумента

$$F_k(\eta) = \frac{\eta^{k+1}}{\Gamma(k+2)} [1 + R_k(\eta)], \quad (3.78)$$

где $R_k(\eta)$ — асимптотический ряд по отрицательным степеням η , первый член которого равен $\pi^2 \frac{\Gamma(k+2)}{6\Gamma(k)\eta^2}$, найдите уравнение для определения энергии Ферми при отличных от нуля магнитных полях и при выключении магнитного поля. Найдите выражение для энергии Ферми в случае, когда под уровнем Ферми имеется лишь один уровень Ландау.

Решение. Выражение для среднего числа N частиц системы, получаемое с помощью соотношений (3.73) и (3.74), имеет вид

$$N = \frac{V}{\pi^{\frac{3}{2}} \hbar^2 L} \frac{(2m)^{\frac{1}{2}}}{V_0^{\frac{1}{k}}} \frac{eB}{c} \Gamma\left(\frac{k+1}{k}\right) (kT)^{\frac{k+2}{2k}} \sum_{n=0}^{\infty} F_{\frac{2-k}{2k}}(\mu_n). \quad (3.79)$$

Используя формулу (3.78), получаем при абсолютном нуле температуры следующее выражение для концентрации $\frac{N}{V}$:

$$\frac{N}{V} = \frac{(2m)^{\frac{1}{2}}}{\pi^2 \hbar^2 L} \frac{eB}{c V_0^{\frac{1}{k}}} B\left(\frac{k+1}{k}, \frac{1}{2}\right) \sum_{n=0}^{n_F} \left(\mu - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)\right)^{\frac{k+2}{2k}}. \quad (3.80)$$

Соотношение (3.80) можно рассматривать как уравнение для определения μ при заданной концентрации $\frac{N}{V}$ электронов в пленке.

При выключении магнитного поля ($B \rightarrow 0$) выражение (3.80) принимает вид

$$\frac{N}{V} = \frac{2^{\frac{1}{2}} m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 L \hbar^2 V_0^{\frac{1}{k}}} B\left(\frac{k+1}{k}, \frac{1}{2}\right) \frac{2k}{3k+2} \mu_0^{\frac{3k+2}{2k}}. \quad (3.81)$$

Здесь μ_0 — химический потенциал при абсолютном нуле температуры (энергия Ферми) в отсутствие магнитного поля.

Чтобы убедиться в справедливости (3.81), достаточно заметить суммирование по уровням Ландау в (3.80) интегрированием:

$$\sum_{n=0}^{n_F} \left(\mu - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)\right)^{\frac{k+2}{2k}} \rightarrow \int_0^{\frac{\mu_0}{\omega_c}} dx (\mu_0 - \hbar\omega_c x)^{\frac{k+2}{2k}}.$$

При увеличении индукции магнитного поля число уровней Ландау, расположенных ниже уровня Ферми, уменьшается. Обо-

значим через B_n значение магнитного поля, при котором n -й уровень Ландау пересекает уровень Ферми. При этом в сумме по n в (3.80) остается $n_F - 1$ слагаемых, а значение химического потенциала есть

$$\mu(B_n) = \frac{eB_n}{mc} \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.82)$$

Находя отсюда B_n и подставляя в выражение (3.80) для концентрации $\frac{N}{V}$, получим

$$\mu(B_n) = \left\{ \frac{\pi^2 \hbar^2 L V_0^{\frac{1}{k}} \frac{N}{V}}{2^{\frac{1}{2}} m^{\frac{3}{2}} B \left(\frac{k+1}{k}, \frac{1}{2} \right)} \left(\sum_{v=1}^n \nu^{\frac{k+1}{2k}} \right)^{-1} \right\}^{\frac{2k}{3k+2}} \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

В случае сильного магнитного поля, когда под уровнем Ферми остается единственный уровень Ландау с $n = 0$, в формуле (3.80) остается одно слагаемое, и зависимость химического потенциала от магнитного поля принимает вид

$$\mu(B_n) = \frac{\hbar \omega_c}{2} + \left\{ \frac{\pi^2 \hbar^2 L V_0^{\frac{1}{k}} \frac{N}{V}}{2^{\frac{1}{2}} m^{\frac{3}{2}} B \left(\frac{k+1}{k}, \frac{1}{2} \right) \omega_c} \right\}^{\frac{2k}{3k+2}}.$$

Анализ полученных формул показывает, что учет изменения химического потенциала в магнитном поле необходим только в случае, когда под уровнем Ферми находится лишь несколько уровней Ландау.

14. Найти зависимость от температуры химического потенциала бозе-газа.

Решение. Химический потенциал бозе-газа обращается в нуль при температуре бозе-эйнштейновской конденсации T_0 , определяемой условием, которое следует из (3.5) ($k = 1$):

$$\frac{N}{V} = g \frac{(mT_0)^{\frac{3}{2}}}{2^{\frac{1}{2}} \pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{dz z^{\frac{1}{2}}}{e^z - 1} \equiv AT_0^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \frac{dz z^{\frac{1}{2}}}{e^z - 1}. \quad (3.83)$$

Ниже этой температуры химический потенциал тождественно равен нулю вплоть до абсолютного нуля температуры. При температурах $T \geq T_0$ химический потенциал отрицателен и мал

по модулю. Выше T_0 выражение для концентрации $\frac{N}{V}$ можно записать в виде

$$\frac{N}{V} = AT^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \frac{dz z^{\frac{1}{2}}}{e^{z-\frac{\mu}{T}} - 1}. \quad (3.84)$$

Прибавляя к (3.84) и вычитая из него выражение (3.84) при $\mu = 0$, получаем

$$\frac{N}{V} = AT^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} dz z^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{e^{z-\frac{\mu}{T}} - 1} - \frac{1}{e^z - 1} \right) + AT^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \frac{dz z^{\frac{1}{2}}}{e^z - 1}. \quad (3.85)$$

Последнее слагаемое в правой части (3.85) равно, как следует из (3.83), $\frac{N}{V} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}}$. В первом слагаемом в правой части (3.85) основной вклад в интеграл дают малые значения $z \geq 0$. Поэтому экспоненты можно разложить в ряды, ограничиваясь линейными членами. После этого выражение (3.85) принимает вид

$$\frac{N}{V} \left[1 - \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}} \right] = -A |\mu| T^{\frac{1}{2}} \int_0^{\infty} \frac{dz}{z^{\frac{1}{2}} \left(z + \frac{|\mu|}{T} \right)}. \quad (3.86)$$

Интеграл в (3.86) легко вычисляется:

$$\int_0^{\infty} \frac{dz}{z^{\frac{1}{2}} \left(z + \frac{|\mu|}{T} \right)} = \pi \left(\frac{T}{|\mu|} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Подставляя это выражение в (3.86), получаем формулу для химического потенциала бозе-газа при температуре $T \geq T_0$:

$$\mu = - \frac{\left(\frac{N}{V} \right)^2}{A^2 \pi^2 T_0^3} \left(T^{\frac{1}{2}} - \frac{T_0^{\frac{3}{2}}}{T} \right)^2.$$

15. В сосуде объемом V вакуум. Давление на стенки сосуда обусловлено тепловым излучением стенок. Выразите давление p через плотность и энергию теплового излучения.

Решение. Тепловое излучение стенок сосуда можно рассматривать как результат гармонических колебаний, при которых происходит излучение. Поскольку для энергии кванта колебаний

справедливо соотношение $\varepsilon = \hbar\omega = \hbar kc$, то число колебаний в объеме V с волновым вектором \mathbf{k} в интервале $(\mathbf{k}, \mathbf{k} + d\mathbf{k})$ есть

$$2 \frac{V d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = 2 \frac{V d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad (3.87)$$

где множитель «2» появляется в результате учета двух независимых направлений поляризации излучения. Используя выражение (2.78) для статистической суммы квантового осциллятора, после интегрирования по угловым переменным и перехода к ω -представлению получим для свободной энергии излучения выражение

$$F(V, T) = -kT \ln Q = \frac{kTV}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \ln \left(2 \operatorname{sh} \frac{\hbar\omega}{2kT} \right) \omega^2 d\omega. \quad (3.88)$$

Теперь для давления p находим:

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = - \frac{kT}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \ln \left(2 \operatorname{sh} \frac{\hbar\omega}{2kT} \right) \omega^2 d\omega. \quad (3.89)$$

Выполняя в (3.89) интегрирование по частям и учитывая, что внеинтегральный член равен нулю после подстановки пределов интегрирования, имеем:

$$\begin{aligned} p &= \frac{\hbar}{6\pi^2 c^3} \int_0^\infty \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2kT} \omega^3 d\omega = \\ &= \frac{1}{3} \int_0^\infty \left\{ \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \right\} \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3} = \frac{1}{3} u. \end{aligned} \quad (3.90)$$

Последнее выражение соответствует одной трети плотности энергии излучения, поскольку в фигурных скобках стоит средняя энергия одного осциллятора с частотой ω .

Отметим, что к соотношению (3.90) можно прийти иначе, доказав сначала соотношение

$$\Omega = -pV = -\frac{E}{3}, \quad (3.91)$$

справедливо для ультрарелятивистского газа, и вычисляя затем среднее значение энергии излучения как энергии газа фотонов с функцией распределения Планка.

16. Найдите теплоемкости C_V и C_p для равновесного фотонного газа.

Решение. Для нахождения теплоемкости C_V удобно воспользоваться выражением (3.88), сделав в нем замену переменной $\frac{\hbar\omega}{kT} = x$. Тогда выражение для свободной энергии F принимает вид

$$F(V, T) = \sigma VT^4, \quad (3.92)$$

где σ — число, не зависящее от V и T . Теперь для энтропии S находим:

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = 4\sigma VT^3, \quad (3.93)$$

а для теплоемкости при постоянном объеме C_V получаем соответственно:

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = 12\sigma VT^3. \quad (3.94)$$

Для нахождения значения C_p удобно воспользоваться термодинамическим соотношением

$$C_p = C_V - T \frac{\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V^2}{\left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T}. \quad (3.95)$$

Как следует из результатов предыдущей задачи, для равновесного газа фотонов (черного излучения) производная $\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V$ отлична от нуля, а производная $\left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T = 0$: давление черного излучения не зависит от объема. Поэтому для равновесного фотонного газа $C_p \rightarrow \infty$.

Отметим, что с помощью соотношения (3.93) легко получить уравнение адиабаты для черного излучения. Поскольку при равновесном (обратимом) адиабатическом процессе энтропия не меняется, то уравнение адиабат имеет вид

$$VT^3 = \text{const}. \quad (3.96)$$

17. Найдите большой термодинамический потенциал Ω и термодинамический потенциал Гиббса Φ для равновесного фотонного газа.

Решение. Газ фотонов — идеальный вследствие линейности уравнений электродинамики для вакуума. Поэтому для установления равновесия в таком газе необходим контакт с веще-

ством. В результате число фотонов — это переменная величина, значение которой определяется из условия теплового равновесия. В равновесии свободная энергия газа фотонов имеет минимум, поэтому

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} = 0. \quad (3.97)$$

Это означает, что химический потенциал равновесного излучения тождественно равен нулю.

Из термодинамического определения Ω и Φ при этом следуют равенства:

$$\Omega = F - \mu N = F, \quad (3.98)$$

$$\Phi = U - TS + pV = F - \Omega = 0. \quad (3.99)$$

В справедливости последнего соотношения можно убедиться и с помощью соотношений (3.57) и (3.58), полученных в задаче № 11.

18. Покажите, что при уменьшении абсолютной температуры отрицательный химический потенциал бозе-газа увеличивается и при некоторой температуре достигает предельно возможного значения $\mu = 0$.

Решение. Используя функцию распределения Бозе—Эйнштейна,

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right) - 1}, \quad (3.100)$$

запишем выражение для полного числа частиц N бозе-газа в виде

$$N = \int_0^{\infty} \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (3.101)$$

где $\rho(\varepsilon) = A\varepsilon^{1/2}$. Применяя правило дифференцирования неявных функций, получим для производной $\frac{\partial \mu}{\partial T}$:

$$\frac{\partial \mu}{\partial T} = \frac{\frac{\partial}{\partial T} \int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} \left(\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right) - 1 \right)^{-1} d\varepsilon}{\frac{\partial}{\partial \mu} \int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} \left(\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right) - 1 \right)^{-1} d\varepsilon}. \quad (3.102)$$

Вычисляя входящие в правую часть (3.102) производные и учитывая, что $\varepsilon - \mu > 0$, убеждаемся, что

$$\frac{\partial \mu}{\partial T} < 0. \quad (3.103)$$

Нулевое значение химического потенциала ($\mu = 0$) достигается при температуре T_0 , определяемой соотношением

$$N = A (kT_0)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{1}{2}} dx}{e^x - 1}. \quad (3.104)$$

Интеграл в правой части (3.104) положителен и равен приблизительно 2,31. Поэтому уравнение (3.104) всегда имеет положительные решения для T_0 , называемой температурой бозе-эйнштейновской конденсации.

19. Покажите, что при температуре, меньшей температуры T_0 бозе-эйнштейновской конденсации, давление в газе не зависит от его объема.

Решение. Вычисляем значение энергии бозе-газа при $T < T_0$. Указывая, что при $T < T_0$ химический потенциал μ равен нулю, имеем

$$E = A (kT)^{\frac{5}{2}} \int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{3}{2}} dx}{e^x - 1}, \quad (3.105)$$

где постоянная A пропорциональна объему V газа. Теплоемкость C_V при постоянном объеме вычисляется с помощью (3.105) и равна

$$C_V = \frac{5E}{2T}. \quad (3.106)$$

Интегрируя соотношение (3.106), получаем для энтропии S :

$$S = \frac{5E}{3T}. \quad (3.107)$$

Теперь для свободной энергии F имеем:

$$F = E - TS = -\frac{2}{3}E, \quad (3.108)$$

что соответствует равенству $F = \Omega$ при $\mu = 0$. Вычисляя давление p в соответствии с соотношением

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,N} = \frac{2}{3} \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_{T,N} \quad (3.109)$$

и учитывая равенство (3.105), получим, что p пропорционально $T^{\frac{5}{2}}$ и не зависит от объема V .

20. Получить формулу для нахождения средних значений с помощью квантовой функции распределения Вигнера.

Решение. Среднее значение любого одночастичного оператора A дается формулой (2.12). Запишем ее в координатном представлении:

$$\langle A \rangle = \text{Sp}_\sigma \int dr' dr'' \langle \mathbf{r}' | \rho | \mathbf{r}'' \rangle \langle \mathbf{r}'' | A | \mathbf{r}' \rangle, \quad (3.110)$$

где Sp_σ означает взятие шпура по спиновым переменным.

Используя выражение для матричного элемента оператора плотности через квантовую функцию распределения Вигнера (3.11), найдем

$$\langle \mathbf{r}' | \rho | \mathbf{r}'' \rangle = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} (\mathbf{r}' - \mathbf{r}'')\right) f\left(\mathbf{p}, \frac{\mathbf{r}' + \mathbf{r}''}{2}\right). \quad (3.111)$$

Совершаем замену переменных:

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2} (\mathbf{r}' + \mathbf{r}''), \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}''.$$

Теперь выражение (3.110) принимает вид

$$\begin{aligned} \langle A \rangle = \text{Sp}_\sigma \int \frac{d\mathbf{R} d\mathbf{r} d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}\right) \times \\ \times f(\mathbf{p}, \mathbf{R}) \left\langle \mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2} \left| A \right| \mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2} \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.112)$$

Вводя определение

$$A(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = \int d\mathbf{r} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}\right) \left\langle \mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2} \left| A \right| \mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2} \right\rangle, \quad (3.113)$$

переписываем соотношение (3.112) следующим образом:

$$\langle A \rangle = \text{Sp}_\sigma \int \frac{d\mathbf{R} d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} f(\mathbf{p}, \mathbf{R}) A(\mathbf{p}, \mathbf{R}). \quad (3.114)$$

Соотношение (3.113) называется преобразованием Вейля квантовомеханического оператора A . Формула (3.114) определяет правило вычисления средних значений в смешанном представлении.

21. Найти явный вид преобразования Вейля для произвольной функции оператора импульса $\varphi(\hat{p})$.

Решение. Исходим из выражения (3.113). Имеем

$$\varphi(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = \int d\mathbf{r} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}\right) \left\langle \mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2} \left| \varphi(\hat{p}) \right| \mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2} \right\rangle. \quad (3.115)$$

Используя дираковские обозначения для векторов состояния и учитывая свойство полноты

$$\int d\mathbf{p}_1 |\mathbf{p}_1\rangle \langle \mathbf{p}_1| = 1,$$

можно переписать (3.115) в виде

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = & \int d\mathbf{r} d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}\right) \times \\ & \times \left\langle \mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2} \left| \mathbf{p}_1 \right\rangle \langle \mathbf{p}_1 | \varphi(\hat{p}) | \mathbf{p}_2 \right\rangle \left\langle \mathbf{p}_2 \left| \mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2} \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.116)$$

Величина $\left\langle \mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2} \left| \mathbf{p}_1 \right\rangle$ представляет собой собственную функцию оператора импульса в координатном представлении:

$$\left\langle \mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2} \left| \mathbf{p}_1 \right\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_1 \left(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}\right)\right]. \quad (3.117)$$

Величина $\left\langle \mathbf{p}_2 \left| \mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2} \right\rangle$ представляет собой комплексно сопряженную собственную функцию оператора импульса. С учетом (3.117) выражение (3.116) переписывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = & \int \frac{d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 d\mathbf{r}}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\mathbf{p}\mathbf{r} + \mathbf{p}_1 \left(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}\right) - \right. \right. \\ & \left. \left. - \mathbf{p}_2 \left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}\right)\right]\right\} \langle \mathbf{p}_1 | \varphi(\hat{p}) | \mathbf{p}_2 \rangle. \end{aligned} \quad (3.118)$$

Поскольку оператор в собственном представлении диагонален

$$\hat{p}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle,$$

то

$$\langle \mathbf{p}_1 | \hat{p} | \mathbf{p}_2 \rangle = \mathbf{p}_1 \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2),$$

и для $\langle \mathbf{p}_1 | \varphi(\hat{p}) | \mathbf{p}_2 \rangle$ справедливо равенство

$$\langle \mathbf{p}_1 | \varphi(\hat{p}) | \mathbf{p}_2 \rangle = \varphi(\mathbf{p}_1) \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2). \quad (3.119)$$

Подставляя (3.119) в (3.118) и учитывая интегральное представление для δ -функции

$$\delta(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{r} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}\right),$$

получаем

$$\varphi(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = \varphi(\mathbf{p}),$$

т. е. преобразование Вейля любой функции оператора импульса равно классическому значению этой функции от импульсной переменной.

22. Построить квантовую функцию распределения Вигнера для свободных частиц со спином $1/2$.

Решение. Исходим из выражения, задающего вид матрицы плотности в координатном представлении:

$$\langle \mathbf{r}_1, \sigma_1 | \rho | \mathbf{r}_2, \sigma_2 \rangle = \sum_i P_i \psi_i(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \psi_i^*(\mathbf{r}_2, \sigma_2), \quad (3.120)$$

где $\psi_i(\mathbf{r}, \sigma)$ — волновая функция в состоянии, задаваемом набором квантовых чисел $\{i\}$. Для свободных частиц $\{i\} = p_x, p_y, p_z, s$, где s — спиновое квантовое число. Считая, что частица помещена в «ящик» объемом V , запишем $\psi_{ps}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma})$ в виде

$$\psi_{ps}(\mathbf{r}, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}\right) X_s(\sigma), \quad (3.121)$$

где $X_s(\boldsymbol{\sigma})$ — двухкомпонентный спинор. В рассматриваемом случае энергия не зависит от спина, все состояния двукратно вырождены по спиновой переменной, а матрица плотности диагональна в спиновом пространстве.

Вероятность P_i реализации чистого состояния i определяется фермиевской функцией распределения. Найти ее явный вид можно с помощью условия нормировки

$$\text{Sp } \rho = \text{Sp}_\sigma \int d\mathbf{r} \langle \mathbf{r}, \sigma | \rho | \mathbf{r}, \sigma \rangle = 1.$$

Переходя в (3.120) от суммирования по дискретным квантовым числам p_j к интегрированию по обычному правилу

$$\sum_{\mathbf{p}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p}$$

и учитывая, что

$$\sum_s X_s(\sigma) X_s^*(\sigma') = \delta_{\sigma\sigma'},$$

получаем

$$P_i \rightarrow \frac{1}{2N} f(\mathbf{p}), \quad (3.122)$$

где N — число частиц системы, а $f(\mathbf{p})$ — функция Ферми—Дирака.

Теперь (3.120) записывается в виде

$$\langle \mathbf{r}_1, \sigma_1 | \rho | \mathbf{r}_2, \sigma_2 \rangle = \frac{\delta_{\sigma_1\sigma_2}}{2N} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} f(\mathbf{p}) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\right). \quad (3.123)$$

Используя формулу (3.11), получаем с помощью (3.123)

$$\begin{aligned} f_{\sigma_1\sigma_2}(\mathbf{p}, \mathbf{R}) &= \frac{\delta_{\sigma_1\sigma_2}}{2N} \int \frac{d\mathbf{r}d\mathbf{p}_1}{(2\pi\hbar)^3} f(\mathbf{p}_1) \times \\ &\times \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \left[\mathbf{p}\mathbf{r} - \mathbf{p}_1 \left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}\right) + \mathbf{p}_1 \left(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}\right) \right]\right\} = \frac{\delta_{\sigma_1\sigma_2}}{2N} f(\mathbf{p}). \end{aligned}$$

Итак, диагональный матричный элемент функции распределения Вигнера для свободных частиц с точностью до множителя $1/(2N)$ совпадает с функцией Ферми—Дирака.

23. Построить равновесную квантовую функцию распределения Вигнера для электронов, находящихся в однородном квантующем магнитном поле, учитывая спиновое расщепление энергетических уровней.

Решение. Исходим из выражения (3.120) для матричного элемента одночастичного оператора плотности в координатном представлении, явно указывая спиновые переменные:

$$\langle \mathbf{r}_1, \sigma_1 | \rho | \mathbf{r}_2, \sigma_2 \rangle = \sum_i P_i \psi_i(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \psi_i^*(\mathbf{r}_2, \sigma_2). \quad (3.124)$$

Выберем векторный потенциал \mathbf{A} однородного магнитного поля в виде $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = (-By, 0, 0)$. Набор квантовых чисел, определяющих состояние электрона, есть $\{i\} = k_x, k_z, n, s$, где σ означает z -компоненту спина и принимает значения $\sigma = \pm 1/2$, а волновая функция представляет собой двухкомпонентный спинор. Координатная часть φ волновой функции ψ имеет вид ($\hbar = 1$)

$$\varphi_{n,p_x,p_z}(\mathbf{r}) = \left(\frac{m\omega_c}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} (2^n n! L_x L_z)^{-\frac{1}{2}} \times \\ \times \exp[i(k_x x + k_z z)] \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) H_n(s), \quad (3.125)$$

где $s^2 = m\omega_c [y + k_x (m\omega_c)]^2$, H_n — полином Эрмита порядка n ; L_x , L_z — линейные размеры образца по осям x и y . Вероятность P_i определяется функцией распределения Ферми—Дирака. В принятом приближении, когда учитывается спиновое расщепление энергетических уровней, имеем

$$P_i = \frac{1}{2} \frac{1}{N} \left[1 + \exp \frac{\frac{k_z^2}{2m} + \omega_c \left(n + \frac{1}{2} + \sigma \right) - \mu}{T} \right]^{-1} \equiv \\ \equiv W(n, \sigma, k_z), \quad (3.126)$$

где N — число частиц в системе. С помощью (3.124) и (3.126) имеем, переходя к новым переменным $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, следующее выражение для матричного элемента функции распределения Вигнера в спиновом пространстве:

$$f_{\sigma_1, \sigma}(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = \int d\mathbf{r} \exp(-i\mathbf{p}\mathbf{r}) \sum_{n, \sigma, k_x, k_z} W(n, \sigma, k_z) \times \\ \times \psi_{n, \sigma, k_x, k_z} \left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, \sigma_1 \right) \psi_{n, \sigma, k_x, k_z}^* \left(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}, \sigma_2 \right). \quad (3.127)$$

Переходим от суммирования по k_x и k_z к интегрированию с помощью обычного правила

$$\sum_{k_x, k_z} \rightarrow \frac{L_x L_z}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x dk_z.$$

Используя формулу (3.125) для волновой функции электрона и интегральное представление для δ -функции

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp(ikx),$$

приводим после выполнения интегрирования по x и z и суммирования по σ выражение (3.127) к виду

$$\begin{aligned}
 f_{\sigma_1, \sigma_2}(\mathbf{p}, \mathbf{R}) &= \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{m\omega_c}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int dy dk_x dk_z \sum_{n, \sigma} W(n, \sigma, k_z) \times \\
 &\quad \times \exp(-ipy) \delta(p_x - k_x) \delta(p_z - k_z) \times \\
 &\quad \times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[(u+v)^2 + (u-v)^2 \right] \right\} H_n(u+v) H_n(u-v), \\
 &\hspace{20em} (3.128) \\
 u^2 &= m\omega_c \left[Y + \frac{k_x}{m\omega_c} \right]^2, \quad v^2 = \frac{m\omega_c y^2}{4}.
 \end{aligned}$$

Отметим, что в отличие от вычисления плотности состояний в квантующем магнитном поле (задача 2.19), где интегрирование по проекции импульса, характеризующей положение центра осциллятора Ландау, проводилось в конечных пределах, здесь интегрирование по k_x проводится от $-\infty$ до $+\infty$. Это связано с тем, что вignerовская функция распределения определена при всех значениях импульса. Напомним, что квантовая функция распределения Вигнера не может рассматриваться как вероятность реализации определенных состояний, и поэтому данное обстоятельство не приводит к каким-либо недоразумениям.

Для интегрирования по y воспользуемся соотношением

$$\begin{aligned}
 &\int_{-\infty}^{\infty} dv \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[(p_1 + v)^2 + (p_1 - v)^2 \right] \right\} \times \\
 &\quad \times \exp(2ip_2 v) H_n(p_1 + v) H_n(p_1 - v) = \\
 &\quad = (-1)^n 2^n n! \pi^{\frac{1}{2}} \exp(-w^2) L_n(2w^2), \\
 p_1 &= (m\omega_c)^{\frac{1}{2}} \left(Y + \frac{p_x}{m\omega_c} \right), \quad p_1 = \frac{p_y}{(m\omega_c)^{\frac{1}{2}}}, \quad w^2 = p_1^2 + p_2^2,
 \end{aligned}$$

L_n — полином Лагерра порядка n . После замены переменной $v = \frac{(m\omega_c)^{\frac{1}{2}} y}{2}$ и вычисления интеграла по v выражение (3.128) записывается следующим образом:

$$f_{\sigma_1 \sigma_2}(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = 2 \sum_{n, \sigma} (-1)^n W(n, \sigma, p_z) \exp(-w^2) L_n(2w^2). \quad (3.129)$$

Формула (3.129) дает функцию $f(\mathbf{p}, \mathbf{R})$, явно зависящую от \mathbf{R} , хотя очевидно, что в однородном магнитном поле рассматриваемая система является пространственно однородной. Причина этого заключается в использовании канонического импульса \mathbf{p} .

Если перейти к кинетическому импульсу $\mathbf{P} = \mathbf{p} - (e/c)\mathbf{A}(\mathbf{R})$, то в силу выбранной калибровки векторного потенциала имеем

$$P_x = p_x + \frac{e}{c}BY, \quad P_y = p_y, \quad P_z = p_z.$$

Теперь $w^2 = \frac{P_x^2 + P_y^2}{m\omega_c}$ и функция распределения Вигнера $f(\mathbf{P}, \mathbf{R})$ оказывается не зависящей от пространственных координат: $f = f(\mathbf{P})$.

24. Выполнить переход к классической статистике в выражении для квантовой функции распределения Вигнера для электрона в квантующем магнитном поле:

$$f(\mathbf{P}) = 2 \sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n W(n, \sigma, P_z) \exp(-w^2) L_n(2w^2), \quad (3.130)$$

$$W(n, \sigma, P_z) = \frac{1}{2N} \left\{ 1 + \exp \frac{\frac{p_z^2}{2m} + \omega_c \left(n + \sigma + \frac{1}{2} \right) - \mu}{T} \right\}^{-1},$$

$$w^2 = \frac{P_x^2 + P_y^2}{m\omega_c}.$$

Решение. При переходе к классической статистике следует прежде всего отбросить единицу в знаменателе выражения для функции распределения Ферми—Дирака. При этом появляется возможность в явном виде выполнить суммирование по спиновой переменной $\sigma = \pm \frac{1}{2}$. В результате получаем

$$\begin{aligned} f(\mathbf{P}) = & \frac{2}{N} \left[\exp \frac{\omega_c}{2T} + \exp \left(-\frac{\omega_c}{2T} \right) \right] \times \\ & \times \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \exp \left[-\frac{\frac{P_z}{2m} + \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) - \mu}{T} \right] \times \\ & \times \exp(-w^2) L_n(2w^2). \quad (3.131) \end{aligned}$$

Теперь можно выполнить суммирование по n , воспользовавшись выражением для производящей функции полиномов Лагерра

$$(1 - z)^{-\alpha-1} \exp \frac{xz}{z-1} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^{\alpha}(x) z^n, \quad |z| < 1,$$

где L_n^α — присоединенный полином Лагерра. В результате формула (3.131) переписывается следующим образом:

$$f(\mathbf{P}) = \frac{2}{N} \left[\exp \frac{\omega_c}{2T} + \exp \left(-\frac{\omega_c}{2T} \right) \right] \exp(-w^2) \exp \left[-\frac{P_z^2}{2m} + \frac{\omega_c}{2-\mu} \right] \times \\ \times \left[\frac{1}{1 + \exp \left(-\frac{\omega_c}{T} \right)} \exp \frac{-2w^2 \exp \left(-\frac{\omega_c}{T} \right)}{-\exp \left(-\frac{\omega_c}{T} \right) - 1} \right].$$

После элементарных преобразований это дает

$$f(\mathbf{P}) = \frac{2}{N} \exp \frac{\mu}{T} \exp \left(-\frac{P_z^2}{2mT} - \frac{P_x^2 + P_y^2}{m\omega_c} \operatorname{th} \frac{\omega_c}{2T} \right). \quad (3.132)$$

Соотношение (3.132) можно переписать в несколько иной форме, если воспользоваться условием нормировки квантовой функции распределения:

$$\int \frac{d\mathbf{P}d\mathbf{R}}{(2\pi)^3} f(\mathbf{P}, \mathbf{R}) = 1. \quad (3.133)$$

Вычисление интеграла в (3.133) после подстановки $f(\mathbf{P})$, даваемой формулой (3.132), приводит к результату

$$\exp \frac{\mu}{T} = \frac{1}{m\omega_c} \operatorname{th} \left(\frac{\omega_c}{2T} \right) \frac{1}{2\pi} (2\pi mT)^{-\frac{1}{2}} \frac{N}{V},$$

после чего формула (3.132) переписывается в виде

$$f(\mathbf{P}) = \frac{2T}{V\omega_c} (2\pi mT)^{-\frac{3}{2}} \operatorname{th} \left(\frac{\omega_c}{2T} \right) \times \\ \times \exp \left(-\frac{P_z^2}{2mT} - \frac{P_x^2 + P_y^2}{m\omega_c} \operatorname{th} \frac{\omega_c}{2T} \right). \quad (1.134)$$

Формула (3.134) показывает, что равновесная функция распределения электронов в квантующем магнитном поле в пределе классической статистики является «двухтемпературной», ибо ее можно записать в следующем виде:

$$f(\mathbf{P}) = \frac{1}{V} \frac{(2\pi m)^{-\frac{3}{2}}}{T_\perp T_\parallel^{\frac{1}{2}}} \exp \left(-\frac{P_z^2}{2mT_\parallel} - \frac{P_x^2 + P_y^2}{mT_\perp} \right),$$

где «продольная» температура T_{\parallel} — это обычная температура T , а «поперечная» температура T_{\perp} определяется соотношением

$$T_{\perp} = \frac{\omega_c}{2 \operatorname{th} \left(\frac{\omega_c}{2T} \right)}.$$

Таким образом, существование двух температур для системы электронов в квантующем магнитном поле в пределе классической статистики может быть объяснено проявлением квантовых свойств при высоких температурах, когда статистика уже становится классической.

25. Покажите прямым вычислением, что энергия основного состояния электронов в квантующем магнитном поле получается одинаковой независимо от того, вычисляется ли она с помощью функции распределения Ферми—Дирака, с помощью функции распределения Вигнера в соответствии с правилом (3.114) или с функцией Вигнера, но путем усреднения не преобразования Вейля оператора энергии, а истинного квантовомеханического спектра электронов.

Решение. Пренебрежем для простоты спиновым расщеплением энергетических уровней в магнитном поле и воспользуемся системой единиц с $\hbar = c = 1$.

Непосредственное вычисление энергии электронов с помощью функции Ферми—Дирака

$$E = \sum_{n, p_z, p_y, \sigma} \left\{ \exp \left[\frac{\hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m} - \mu}{kT} \right] + 1 \right\}^{-1} \times \\ \times \left(\hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m} - \mu \right) \quad (3.135)$$

приводит при абсолютном нуле температуры к следующему выражению для энергии основного состояния:

$$E_0 = \frac{V \omega_c^{\frac{5}{2}} m^{\frac{3}{2}} 2^{\frac{1}{2}}}{3\pi^2} \sum_{n=0}^{n_F} \left(\frac{\mu}{\omega_c} + 2 \left(n + \frac{1}{2} \right) \right) \left(\frac{\mu}{\omega_c} - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.136)$$

В выражениях (3.135) и (3.136) μ и ω_c — химический потенциал (равный энергии Ферми при абсолютном нуле температуры) и циклотронная частота. При переходе от (3.135) к (3.136) использовались те же преобразования, что фигурировали в задаче № 19 второй главы.

Формула для функции распределения Вигнера в квантующем магнитном поле была получена в задаче № 23 и в пренебрежении спиновым расщеплением энергетических уровней в представлении кинетического импульса записывается в виде

$$f(P_{\parallel}, P_{\perp}) = 4e^{-w^2} \sum_{n=0}^{n_F} W(n, P_{\parallel}) (-1)^n L_n(2w^2). \quad (3.137)$$

Доказательство того, что вычисление E_0 с помощью соотношения (3.114) и формулы (3.137) приводит к выражению (3.136), после вычисления интегралов по импульсу сводится к доказательству соотношения

$$\sum_{n=0}^{n_F} (2n + 1 - (-1)^n F(-n, 2; 1; 2)) \left(1 - \frac{\omega_c}{\mu} \left(n + \frac{1}{2}\right)\right)^{\frac{1}{2}} = 0, \quad (3.138)$$

где $F(\alpha, \beta; \gamma; z)$ — гипергеометрическая функция. В действительности выполняется более сильное соотношение

$$F(-n, 2; 1; 2) = (-1)^n (2n + 1). \quad (3.139)$$

Равенство (3.139) соответствует тому, что одинаковое значение энергии при двух рассматриваемых способах вычисления получается не после суммирования по уровням Ландау, а для каждого уровня n . Чтобы убедиться в справедливости (3.139), достаточно выразить гипергеометрическую функцию через гамма-функции:

$$F(\alpha, \beta; \gamma; z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_k (\beta)_k}{(\gamma)_k} \frac{z^k}{k!}, \quad (3.140)$$

где, например,

$$(\alpha)_k = \frac{\Gamma(\alpha + k)}{\Gamma(\alpha)},$$

и воспользоваться соотношением

$$\sum_{k=0}^n (-1)^k p^k (k + 1) C_n^k = (-1)^n (p - 1)^{n-1} (np + p - 1), \quad (3.141)$$

доказательство которого элементарно.

Указанное свойство подсказывает, что выражение

$$E_0 = 4V \int \frac{d\mathbf{P}}{(2\pi)^3} e^{-w^2} \sum_{n=0}^{n_F} (-1)^n W(n, P_{\parallel}) L_n(2w^2) \times$$

$$\times \left(\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{P_{\parallel}^2}{2m} \right), \quad (3.142)$$

соответствующее нахождению энергии E_0 по третьему указанному в условии задачи способу, также должно приводить к результату (3.136). Непосредственное вычисление интегралов по импульсу в (3.142) подтверждает это предположение.

Задачи для самостоятельного решения

26. Показать, что соотношение (3.34) остается справедливым при учете спинового расщепления энергетических уровней в квантующем магнитном поле.

27. Используя выражение для энтропии в квантующем магнитном поле (первая из формул (3.33)), найти выражение для теплоемкости электронного газа и исследовать характер осцилляции при изменении магнитного поля.

28. Показать, что в двумерном бозе-газе бозе-эйнштейновская конденсация отсутствует.

Глава 4

РАВНОВЕСНАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА КВАНТОВЫХ ЖИДКОСТЕЙ. КВАНТОВЫЕ ФЕРМИ- И БОЗЕ-ЖИДКОСТИ

Основная идея теории квантовых жидкостей заключается в замене системы сильно взаимодействующих между собой частиц системой слабо взаимодействующих квазичастиц — элементарных возбуждений в исходной системе. Способ введения таких квазичастиц и закон их дисперсии зависят от природы исходных взаимодействующих частиц и оказываются принципиально различными как для ферми- и бозе-систем, так и для различных систем фермионов и бозонов. Истинными квантовыми жидкостями являются два изотопа гелия: He^3 — ферми-жидкость и He^4 — бозе-жидкость. Принципиальные различия в поведении ферми- и бозе-жидкостей обусловлены тем, что для фермиевской системы справедлив принцип Паули, ограничивающий возможность заполнения энергетических уровней, в то время как для бозевской системы характерна тенденция накопления частиц на низшем энергетическом уровне.

§ 4.1. Нормальная ферми-жидкость

Исходным пунктом теории нормальной несверхпроводящей ферми-жидкости является предположение о том, что при постепенном (адиабатическом) включении взаимодействия между частицами системы классификация энергетических уровней остается неизменной. При этом роль частиц газа переходит к элементарным возбуждениям — квазичастицам, которые также подчиняются статистике Ферми и число которых совпадает с числом частиц N в системе. Матричная в пространстве спина функция распределения квазичастиц $n(\mathbf{p})$ удовлетворяет условию нормировки

$$\text{Sp}_\sigma \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \hat{n}(\mathbf{p}) = \frac{N}{V}, \quad (4.1)$$

где V — объем системы, символ Sp_σ означает суммирование по спиновой переменной. Энергия $\varepsilon(\mathbf{p})$ квазичастицы является функционалом функции распределения

$$\delta\widehat{\varepsilon}(\mathbf{p}) = \text{Sp}_{\sigma'} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \widehat{F}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta\widehat{n}(\mathbf{p}'). \quad (4.2)$$

Корреляционная функция $F(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ может быть записана либо в виде

$$\widehat{F}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \varphi(\mathbf{p}, \mathbf{p}') + 4(\widehat{\mathbf{s}} \cdot \widehat{\mathbf{s}}') \psi(\mathbf{p}, \mathbf{p}'), \quad (4.3)$$

где $\widehat{\mathbf{s}}$ — обычные спиновые матрицы, либо в виде

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^{\uparrow\uparrow} &= f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^s + f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a, \\ f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^{\uparrow\downarrow} &= f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^s - f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a. \end{aligned} \quad (4.3a)$$

Разложив матрицы в спиновом пространстве $\widehat{n}(\mathbf{p})$ и $\widehat{\varepsilon}(\mathbf{p})$ по полной системе

$$\begin{aligned} \widehat{n}(\mathbf{p}) &= \frac{1}{2}n(\mathbf{p})\delta_{\alpha\beta} + \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p}) \cdot \widehat{\mathbf{S}}_{\alpha\beta}, \\ \widehat{\varepsilon}(\mathbf{p}) &= \varepsilon(\mathbf{p})\delta_{\alpha\beta} + 2\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{p}) \cdot \widehat{\mathbf{S}}_{\alpha\beta}, \end{aligned} \quad (4.4)$$

получаем выражения, связывающие вариации квазичастичной энергии с вариациями функции распределения квазичастиц δn и векторной спиновой плотности $\delta\boldsymbol{\sigma}$:

$$\begin{aligned} \delta\varepsilon(\mathbf{p}) &= \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \varphi(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{p}'), \\ \delta\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{p}) &= \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \psi(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p}'). \end{aligned} \quad (4.5)$$

Вариации $\delta\widehat{n}(\mathbf{p})$ отличаются от нуля только при значениях импульса, близких к импульсу Ферми p_F . В этой же области лежат и значения аргументов функций ϕ и ψ , поэтому при изотропной ферми-поверхности эти функции зависят только от угла χ между векторами \mathbf{p} и \mathbf{p}' . Введя плотность состояний на уровне Ферми с эффективной массой фермиона m^* $\rho(\varepsilon_F) = \frac{m^* p_F}{(\pi^2 \hbar^3)}$,

удобно использовать безразмерные функции $A(\chi) = \rho(\varepsilon_F)\phi(\chi)$ и $B(\chi) = \rho(\varepsilon_F)\psi(\chi)$, представленные в виде разложений по по-

линомам Лежандра:

$$\begin{aligned}
 A(\chi) &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) A_l P_l(\cos \chi), \\
 B(\chi) &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) B_l P_l(\cos \chi).
 \end{aligned}
 \tag{4.6}$$

§ 4.2. Сверхтекучая бозе-жидкость

Бозе-жидкость характеризуется совокупностью элементарных возбуждений — квазичастиц. Закон дисперсии квазичастиц в системах, обладающих свойством сверхтекучести, имеет вид, показанный на рис. 4.1.

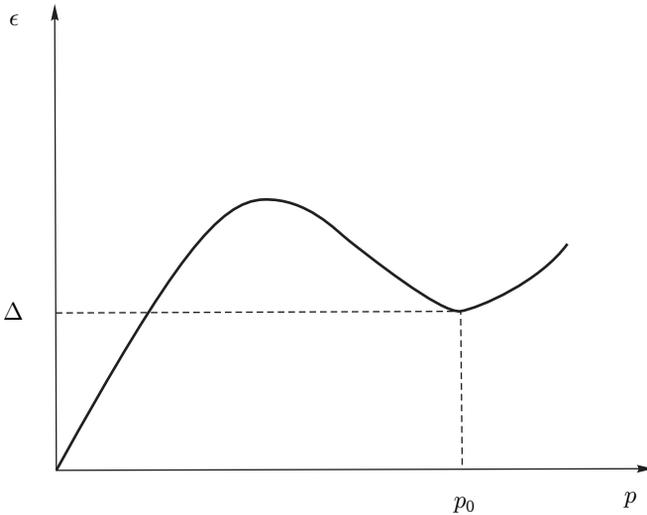


Рис. 4.1

В области малых значений импульса квазичастицы представляют собой звуковые кванты — фононы с законом дисперсии

$$\varepsilon = up.
 \tag{4.7}$$

Возбуждения, соответствующие области минимума дисперсионной кривой, называются ротонами. Их закон дисперсии может быть записан в виде

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \Delta + \frac{(p - p_0)^2}{2m}.
 \tag{4.8}$$

Оба типа квазичастиц — фотоны и ротоны — отвечают разным участкам одной и той же кривой, между которыми имеется непрерывный переход.

Задачи

1. Теория нормальной ферми-жидкости строится в предположении, что при адиабатическом включении взаимодействия между частицами классификация (квантовые числа) уровней энергии остаётся неизменной. Покажите: а) что при таком подходе сохраняется понятие о ферми-поверхности системы и б) такой подход позволяет описать возбужденное состояние реальной системы в терминах квазичастиц фермиевского типа, хорошо определенных вблизи ферми-поверхности.

Решение. Рассмотрим собственное состояние идеальной ферми-системы, характеризующееся определенной функцией распределения $n_{\mathbf{p}}^{(0)}$, и предположим, что взаимодействие между частицами включается бесконечно медленно, т. е. адиабатически. При этом собственное состояние идеальной системы переходит в собственное состояние реальной системы взаимодействующих частиц. Из определения нормальной ферми-жидкости следует, что ее основное состояние получается из некоторого собственного состояния идеальной системы, описываемого функцией распределения $n_{\mathbf{p}}^{(0)}$.

В общем случае реальное основное состояние возникает адиабатически из некоторого возбужденного состояния невзаимодействующей системы.

Будем рассматривать систему при абсолютном нуле температуры: добавим к ней частицу с импульсом \mathbf{p} и опять включим адиабатически взаимодействие между частицами. Мы создадим возбужденное состояние реальной системы с импульсом \mathbf{p} , так как импульс при столкновениях частиц сохраняется. Будем говорить, что возникшее возбужденное состояние системы соответствует некоторому реальному основному состоянию с распределением $n_{\mathbf{p}}^{(0)}$ плюс «квазичастица» с импульсом \mathbf{p} .

Пусть S_F — ферми-поверхность, характеризующая систему в невозмущенном состоянии с распределением $n_{\mathbf{p}}^{(0)}$. В силу принципа Паули, квазичастичные возбуждения могут возникать только в том случае, когда их импульс \mathbf{p} лежит вне S_F . Таким образом, для взаимодействующей системы сохраняется понятие ферми-поверхности, поскольку распределение квазичастиц в им-

пульсном пространстве ограничено ферми-поверхностью невозмущенной системы S_F .

Основное состояние взаимодействующей системы стабильно, поэтому никаких принципиальных трудностей в изложенном описании его возникновения из собственного состояния невзаимодействующей системы нет. Однако возбужденное состояние характеризуется конечным временем жизни. Если время «адиабатического» включения взаимодействия больше времени жизни получающегося возбужденного состояния реальной системы, то состояние распадется до того, как взаимодействие достигает нормальной величины. Очевидно, что в этом случае приведенное рассуждение не имеет смысла. Если же взаимодействие включается слишком быстро, то процесс неадиабатичен, и мы не создадим истинное собственное состояние нормальной ферми-системы.

Время жизни квазичастиц увеличивается по мере приближения ее энергии к ферми-поверхности. Действительно, если рассматривать взаимодействие частиц системы друг с другом при абсолютном нуле температуры, то время свободного пробега τ связано с квантовой неопределенностью $\Delta\varepsilon$ значения энергии квазичастицы (т. е. шириной ее энергетического уровня) соотношением $\Delta\varepsilon \cdot \tau \sim \hbar$. Но время свободного пробега τ обратно пропорционально квадрату расстояния по энергии до ферми-поверхности S_F . Поэтому ширина энергетического уровня квазичастицы убывает по мере приближения к S_F и обращается в нуль на самой ферми-поверхности. Таким образом, квазичастица определена строго, когда она находится непосредственно на ферми-поверхности.

Если реальное возбужденное состояние взаимодействующей ферми-системы описывается распределением n_p , то степень возбуждения системы характеризуется отклонением δn_p от функции распределения основного состояния $n_p^{(0)}$:

$$\delta n_p = n_p - n_p^{(0)},$$

где $n_p^{(0)}$ в соответствии со сказанным отвечает некоторому (вообще говоря, возбужденному) собственному состоянию невзаимодействующих частиц. Однако в силу сказанного выше хорошо определены только те квазичастичные состояния, для которых δn_p лежит непосредственно вблизи ферми-поверхности. При этом физический смысл имеет именно δn_p , а не n_p , ибо определять равновесное распределение $n_p^{(0)}$ в области, где квазичастицы неустойчивы, бессмысленно. Распределение δn_p как

функция импульса, сформирована вблизи ферми-поверхности, соответствующей невзаимодействующей системе.

2. Считая, что функционал от функции распределения квазичастиц, определяющий энергию ферми-системы, имеет вид

$$E(n_{\mathbf{p}}) = E_0 + \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} \delta n_{\mathbf{p}} + O(\delta n^2), \quad (4.9)$$

установите связь между величиной $\delta n_{\mathbf{p}}$, описывающей отклонение функции распределения квазичастиц от функции распределения основного состояния

$$\delta n_{\mathbf{p}} = n_{\mathbf{p}} - n_{\mathbf{p}}^0, \quad (4.10)$$

и $\delta \bar{n}_{\mathbf{p}}$, определяющей отклонение от локального равновесия:

$$\delta \bar{n}_{\mathbf{p}} = n_{\mathbf{p}} - \bar{n}_{\mathbf{p}}^0, \quad (4.11)$$

где $\bar{n}_{\mathbf{p}}^0$ соответствует локальному равновесию квазичастиц, зависящему от состояния окружения.

Решение. Для того, чтобы ввести понятие локального равновесия, рассмотрим свободную энергию системы.

На основании основного положения теории нормальной ферми-жидкости Ландау свободная энергия возбужденного состояния системы, отсчитываемая от основного состояния, записывается в виде

$$F - F_0 = \sum_{\mathbf{p}} (\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu) \delta n_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \delta n_{\mathbf{p}} \delta n_{\mathbf{p}'} + O(\delta n^3). \quad (4.12)$$

В соответствии с (4.12) запишем свободную энергию $(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)$ добавленной к системе квазичастицы в виде

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{p}} - \mu = \varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu + \sum_{\mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \delta n_{\mathbf{p}'}. \quad (4.13)$$

Величину $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{p}}$ можно рассматривать как локальную энергию, зависящую от искажения окружающей среды. Функция распределения, описывающая локальное равновесие, определяется соотношением

$$\bar{n}_{\mathbf{p}}^0 = n^0(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{p}} - \mu), \quad (4.14)$$

которое полностью аналогично соотношению

$$n_{\mathbf{p}}^0 = n^0(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu), \quad (4.15)$$

определяющему действительное равновесие. Входящая в (4.14) и (4.15) функция $n^0(x)$ — обычная функция распределения

Ферми—Дирака. Сравнивая определения (4.10) и (4.11) величин $\delta n_{\mathbf{p}}$ и $\delta \bar{n}_{\mathbf{p}}$, приходим к равенству

$$\delta n_{\mathbf{p}} = \delta \bar{n}_{\mathbf{p}} + \frac{\partial n_{\mathbf{p}}^0 (\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{p}} - \mu)}{\partial \varepsilon_{\mathbf{p}}} (\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{p}}). \quad (4.16)$$

Воспользовавшись соотношением (4.13), переписываем (4.16) в виде

$$\delta \bar{n}_{\mathbf{p}} = \delta n_{\mathbf{p}} - \frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{p}}} \sum_{\mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta n_{\mathbf{p}'}. \quad (4.17)$$

Общее соотношение (4.17) между $\delta n_{\mathbf{p}}$ и $\delta \bar{n}_{\mathbf{p}}$ можно упростить в случае абсолютного нуля температуры $T = 0$. В этом случае

$$\frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon_p} = -\delta(\varepsilon_p - \mu), \quad (4.18)$$

и величины $\delta n_{\mathbf{p}}$ и $\delta \bar{n}_{\mathbf{p}}$ отличны от нуля только на ферми-поверхности. В случае изотропной системы $\delta n_{\mathbf{p}}$ и $\delta \bar{n}_{\mathbf{p}}$ можно разбить на две части — симметричную и антисимметричную по спиновым переменным. Например,

$$\delta n_{\mathbf{p},\pm} = \delta n_{\mathbf{p}}^s \pm \delta n_{\mathbf{p}}^a. \quad (4.19)$$

Далее, разложим эти величины в ряды Фурье по нормированным сферическим функциям. Например,

$$\delta n_{\mathbf{p}}^s = \sum_{l,m} \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu) \delta n_{lm}^s Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (4.20)$$

где θ и φ — полярный и азимутальный углы вектора \mathbf{p} .

Аналогично (4.19) можно разложить на симметричную и антисимметричную по спинам части корреляционную функцию $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$. В отсутствие магнитного поля $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ зависит только от относительной ориентации спинов квазичастиц. Поэтому справедливо представление

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^{\uparrow\uparrow} &= f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^s + f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a, \\ f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^{\uparrow\downarrow} &= f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^s - f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a. \end{aligned} \quad (4.21)$$

В изотропной системе функции $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^s$ и $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a$ зависят только от угла χ между векторами \mathbf{p} и \mathbf{p}' . Их можно разложить в ряд по полиномам Лежандра:

$$f_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}^{s(a)} = \sum_{l=0}^{\infty} f_l^{s(a)} P_l(\cos \chi). \quad (4.22)$$

Наконец, введем плотность состояний $\rho(\varepsilon)$ для квазичастиц с энергией $\varepsilon + \mu$:

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{p}} \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon - \mu). \quad (4.23)$$

Подставляя разложения для $\delta n_{\mathbf{p}}$ и $\delta \bar{n}_{\mathbf{p}}$ в (4.17), используя разложение (4.22) для $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$, соотношение (4.23) для плотности состояний и тождество

$$P_l(\cos \chi) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\theta', \varphi') Y_{lm}^*(\theta, \varphi), \quad (4.24)$$

получим:

$$\begin{aligned} \delta \bar{n}_{lm}^s &= \left(1 + \frac{F_l^s}{2l+1}\right) \delta n_{lm}^s, \\ \delta \bar{n}_{lm}^a &= \left(1 + \frac{F_l^a}{2l+1}\right) \delta n_{lm}^a. \end{aligned} \quad (4.25)$$

В этих выражениях безразмерные коэффициенты F_l^s и F_l^a определены равенством

$$F_l^{s(a)} = \rho(0) f_l^{s(a)}, \quad (4.26)$$

где $\rho(0)$ — плотность состояний на ферми-поверхности.

Понятие локального равновесия оказывается полезным при рассмотрении неравновесных явлений в ферми-жидкости.

3. Найти выражение для эффективной массы $m^* = \rho / \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}}\right)$ квазичастицы в нормальной ферми-жидкости, сравнивая вариации плотности импульса и плотности потока массы, переносимой квазичастицами.

Решение. Плотность импульса ферми-жидкости обычным образом выражается через функцию распределения квазичастиц

$$\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{p} n(\mathbf{p}). \quad (4.27)$$

С другой стороны, пользуясь тем, что число квазичастиц равно числу истинных частиц системы, плотность импульса можно записать как плотность потока массы:

$$m \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} n(\mathbf{p}). \quad (4.28)$$

Отметим, что масса системы не равна сумме масс квазичастиц, поэтому в (4.28) должна стоять именно масса частиц m , а не масса квазичастиц m^* .

Квазичастицы, а следовательно, и их функция распределения, хорошо определены только вблизи ферми-поверхности системы, поэтому имеет смысл приравнять вариации выражений (4.27) и (4.28): при этом в равенстве будут присутствовать только величины $\delta n(\mathbf{p})$. При варьировании выражения (4.28) следует учитывать изменение этого выражения как непосредственно за счет величины $\delta n(\mathbf{p})$, так и за счет изменения функциональной зависимости $\varepsilon(\mathbf{p})$. Имеем

$$\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{p} \delta n(\mathbf{p}) = m \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \delta n(\mathbf{p}) + m \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \delta \varepsilon(\mathbf{p}) \cdot n(\mathbf{p}). \quad (4.29)$$

Используя выражение (4.5) для вариации квазичастичной энергии $\delta \varepsilon(\mathbf{p})$, можно во втором интеграле в правой части (4.29) выполнить интегрирование по частям:

$$\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} n(\mathbf{p}) \frac{\partial \delta \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = - \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^6} \varphi(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{\partial n(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \delta n(\mathbf{p}'). \quad (4.30)$$

Учитывая, что корреляционная функция $\varphi(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ симметрична относительно перестановки переменных \mathbf{p} и \mathbf{p}' , выражение (4.29) после замены переменных в (4.30) $\mathbf{p} \leftrightarrow \mathbf{p}'$ можно переписать следующим образом:

$$\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \delta n(\mathbf{p}) \left[\frac{\mathbf{p}}{m} - \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} + \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \varphi(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{\partial n(\mathbf{p}')}{\partial \mathbf{p}'} \right] = 0. \quad (4.31)$$

В силу произвольности вариации $\delta n(\mathbf{p})$ из (4.31), при учете приведенного в условии задачи определения эффективной массы m^* , следует равенство

$$\frac{\mathbf{p}}{m} = \frac{\mathbf{p}}{m^*} - \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \varphi(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{\partial n(\mathbf{p}')}{\partial \mathbf{p}'} \quad (4.32)$$

Вблизи ферми-поверхности при абсолютном нуле температуры справедливо

$$\left. \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} \right|_{p=p_F} = -2 \frac{\mathbf{p}}{p_F} \delta(p - p_F), \quad (4.33)$$

поскольку функция n определяет суммарную концентрацию квазичастиц с двумя значениями проекции спина.

Вследствие (4.33) при $p = p_F$ выражение (4.32) даёт

$$\frac{\mathbf{p}_F}{m} = \frac{\mathbf{p}_F}{m^*} + 2 \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \varphi(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{\mathbf{p}'_F}{p_F} \delta(p' - p_F). \quad (4.34)$$

В (4.34) можно выполнить интегрирование по модулю импульса p' . Домножая (4.34) скалярно на \mathbf{p}_F , получим

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m^*} + \frac{2p_F}{(2\pi\hbar)^3} \int d\Omega' \varphi(\chi) \cos \chi. \quad (4.35)$$

Направляя полярную ось вдоль вектора \mathbf{p}_F , используя разложение (4.6) для корреляционной функции $\phi(\chi)$ и учитывая соотношения ортогональности для полиномов Лежандра

$$\int_{-1}^1 P_n(x) P_l(x) dx = \frac{2}{2l+1} \delta_{nl},$$

получим из равенства (4.35)

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} \frac{1}{1 + A_1}. \quad (4.36)$$

В выражение для эффективной массы входит только один феноменологический параметр из разложения (4.6).

4. Вычислить скорость обычного низкочастотного ($\omega\tau \ll 1$) звука в нормальной ферми-жидкости, используя термодинамическую формулу $u^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho}$ при низких температурах, когда при $T \rightarrow 0$ энтропия S также стремится к нулю, и адиабатическая и изотермическая сжимаемости не различаются.

Решение. Плотность жидкости ρ определяется соотношением

$$\rho = \frac{mN}{V},$$

где m — масса одной частицы.

Поэтому выражение для квадрата скорости звука можно записать следующим образом:

$$u^2 = \frac{V}{m} \frac{\partial p}{\partial N}. \quad (4.37)$$

Для вычисления производной $\frac{\partial p}{\partial N}$ ее удобно выразить через производную от химического потенциала μ . Учитывая, что хими-

ческий потенциал зависит только от отношения $\frac{N}{V}$, имеем

$$\frac{\partial \mu}{\partial N} = -\frac{V}{N} \frac{\partial \mu}{\partial V}. \quad (4.38)$$

Используя фундаментальное равенство Гиббса

$$dU = TdS - pdV + \mu dN,$$

находим $\frac{\partial p}{\partial N} = -\frac{\partial \mu}{\partial V}$. Подставляя в это выражение производную $\frac{\partial \mu}{\partial V}$ из (4.38), получим для квадрата скорости звука вместо (4.37) выражение

$$u^2 = \frac{N}{m} \frac{\partial \mu}{\partial N}. \quad (4.39)$$

Формула (4.39) позволяет выразить значение u^2 через параметры ферми-жидкостного взаимодействия. Изменение функции $\mu = \varepsilon(p_F)$ при изменении числа частиц N в системе происходит как вследствие изменения импульса Ферми p_F , так и вследствие изменения характера функциональной зависимости $\varepsilon(\mathbf{p})$. Поэтому, используя выражение $\mu = \varepsilon(p_F)$, имеем

$$\delta \mu = \frac{\partial \varepsilon(p_F)}{\partial p_F} \delta p_F + \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \varphi(\mathbf{p}_F, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{p}'). \quad (4.40)$$

При абсолютном нуле температуры вариация δn , связанная с изменением числа δN частиц с обоими значениями проекции спина, приводящими к изменению импульса Ферми на δp_F , равна

$$\delta n(\mathbf{p}) = \begin{cases} 2 & p_F \leq p \leq p_F + \delta p_F \\ 0 & \text{при остальных } p. \end{cases}$$

Учитываем, что функции $\varphi(\mathbf{p}_F, \mathbf{p}'_F)$ зависят только от угла χ между векторами \mathbf{p}_F и \mathbf{p}'_F , и используем соотношение между концентрацией частиц $\frac{N}{V}$ и импульсом Ферми p_F :

$$p_F^3 = 3\hbar^3 \pi^2 \frac{N}{V},$$

откуда имеем

$$p_F^2 \delta p_F = \pi^2 \hbar^3 \frac{\delta N}{V}. \quad (4.41)$$

Теперь, принимая во внимание соотношение

$$\frac{\partial \varepsilon(p_F)}{\partial p_F} \delta p_F = \frac{p_F}{m^*} \delta p_F = \frac{\pi^2 \hbar^3 \delta N}{p_F V m^*},$$

получим вместо (4.40)

$$\delta\mu = \frac{\pi^2 \hbar^3 \delta N}{p_F V m^*} + \frac{1}{4\pi V} \int d\Omega' \varphi(\chi) \cdot \delta N. \quad (4.42)$$

Вычисляя с помощью (4.42) производную $\frac{\partial\mu}{\partial N}$ и используя соотношение (4.41), приходим с помощью (4.39) к выражению

$$u^2 = \frac{p_F}{3mm^*} + \frac{1}{12m} \left(\frac{p_F}{\pi\hbar} \right)^3 \int d\Omega' \varphi(\chi). \quad (4.43)$$

Направляя полярную ось по вектору \mathbf{p}_F , так что $\chi = \theta'$, и подставляя в (4.43) разложение (4.6) для $\phi(\chi)$, получим

$$u^2 = \frac{1}{3} \frac{p_F^2}{mm^*} (1 + A_0). \quad (4.44)$$

Подставляя сюда формулу (4.36) для эффективной массы m^* квазичастиц, можно переписать выражение для u^2 в виде

$$u^2 = \frac{1}{3} \frac{p_F^2}{m^2} \frac{1 + A_0}{1 + A_1}. \quad (4.45)$$

В отсутствие корреляционного взаимодействия, когда $A_0 = A_1 = 0$, формула (4.45) переходит в выражение $u^2 = \frac{1}{3} v_F^2$, определяющее квадрат скорости звука в идеальном ферми-газе.

5. Параметры A_l разложения (4.42) корреляционной функции $\varphi(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ по полиномам Лежандра удовлетворяют определенным условиям, вытекающим из требования устойчивости основного состояния ферми-жидкости относительно возмущений функции распределения квазичастиц. Найти эти условия и объяснить их физический смысл, основываясь на результатах, полученных в задачах 3 и 4.

Решение. Рассмотрим возмущение функции распределения квазичастиц в области значений импульсов, близких к импульсу Ферми p_F . Наличие неустойчивостей привело бы к самопроизвольному изменению основного состояния, в частности, к деформации ферми-поверхности. Граничные значения параметров, отвечающие началу неустойчивости, можно найти простым путем.

Заметим, что если система находится на границе неустойчивости, то при малой деформации ферми-поверхности новое состояние также отвечает равновесию. В случае возмущений,

не зависящих от спина, это означает, что вариация функции распределения квазичастиц должна иметь вид

$$\frac{\partial n_{\mathbf{p}}^{(0)}}{\partial \varepsilon} \delta \varepsilon(\mathbf{p}).$$

Для того, чтобы система была устойчивой по отношению к возмущениям функции распределения, нужно, чтобы это возмущение $\delta n_{\mathbf{p}}$ соответствовало масштабу изменения функции распределения $\frac{\partial n_{\mathbf{p}}^{(0)}}{\partial \varepsilon} \delta \varepsilon(p_F)$, вызванному соответствующим изменением ферми-поверхности:

$$\delta n_{\mathbf{p}} \geq \frac{\partial n_{\mathbf{p}}^{(0)}}{\partial \varepsilon} \delta \varepsilon(\mathbf{p}_F). \quad (4.46)$$

При абсолютном нуле температуры производная в правой части (4.46) имеет δ -образную особенность

$$\frac{\partial n_{\mathbf{p}}^{(0)}}{\partial \varepsilon} = -2\delta(\varepsilon - \varepsilon_F), \quad (4.47)$$

где множитель 2 появляется вследствие того, что функция распределения определяет суммарную концентрацию для двух проекций спина квазичастиц. Подставляем в правую часть (4.46) выражение (4.47) и разложение $\delta \varepsilon(\mathbf{p}_F)$ по нормированным сферическим функциям, которое записывается в виде

$$\delta \varepsilon(\mathbf{p}_F) = \delta \varepsilon(\Omega) = \sum_{l,m} Y_{lm}(\Omega) \delta \varepsilon_{lm}. \quad (4.48)$$

В результате получим

$$\delta n_{\mathbf{p}} \geq -2\delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \sum_{l,m} Y_{lm}(\Omega) \delta \varepsilon_{lm}. \quad (4.49)$$

С другой стороны, выражение для вариации функции распределения квазичастиц на уровне Ферми можно записать в виде

$$\delta n_{\mathbf{p}} = 2\delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \nu(\Omega) = 2\delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \sum_{l,m} Y_{lm}(\Omega) \nu_{lm}, \quad (4.50)$$

где ν_{lm} — коэффициенты разложения функции $\nu(\Omega)$ по сферическим функциям.

Сравнение соотношений (4.49) и (4.50) приводят к условию

$$\nu_{lm} \geq -\delta \varepsilon_{lm}. \quad (4.51)$$

Другое соотношение между коэффициентами разложений ν_{lm} и $\delta \varepsilon_{lm}$ можно получить, если воспользоваться формулой (4.5) для

вариации квазичастичной энергии и подставить в ее правую часть разложение (4.6) для корреляционной функции $\varphi(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ и разложение (4.50) для $\delta n_{\mathbf{p}}$, а в левую часть — разложение (4.48) для $\delta\varepsilon(\mathbf{p}_F)$. Используя теорему сложения для сферических функций

$$P_l(\cos \chi) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\Omega') Y_{lm}(\Omega),$$

получим

$$\delta\varepsilon_{lm} = A_l \nu_{lm}. \quad (4.52)$$

Сравнивая формулы (4.51) и (4.52), получаем

$$(1 + A_l) \nu_{lm} \geq 0. \quad (4.53)$$

Из соотношений (4.53) следует, что новое состояние, возникающее при $\nu_{lm} \neq 0$, будет также соответствовать равновесию, если

$$1 + A_l = 0. \quad (4.54)$$

Условие (4.54) определяет границу устойчивости основного состояния ферми-жидкости относительно не зависящих от спина возмущений функции распределения квазичастиц. Система будет устойчивой относительно малых возмущений, описываемых изменением функции распределения произвольного вида, если для всех l выполняется неравенство

$$1 + A_l > 0. \quad (4.55)$$

Сравнивая условия (4.55) с формулами (4.36) для эффективной массы квазичастиц и (4.9) для квадрата скорости звука в ферми-жидкости, видим, что неравенство $1 + A_1 > 0$ обеспечивает положительность эффективной массы, а условие $1 + A_0 > 0$ (вместе с условием $1 + A_1 > 0$) — положительность квадрата скорости звука. Выполнение этого условия необходимо для того, чтобы в системе не нарастали флуктуации плотности: оно соответствует термодинамическому неравенству $\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right) < 0$, определяющему общее условие устойчивости системы.

6. Обсудите возможность построения теории нормальной заряженной ферми-жидкости, пригодной для описания свойств фермионов, взаимодействующих между собой по закону Кулона.

Решение. Основная идея теории нормальной ферми-жидкости заключается в возможности представления энергии квазичастицы в виде функционала от функции распределения квазичастиц. Соответствующая функциональная зависимость

в нейтральной ферми-жидкости с короткодействующим межчастичным взаимодействием считалась локальной по пространственным переменным. Из-за наличия дальнедействующих кулоновских сил в системе заряженных частиц естественным обобщением соотношения (4.2) является выражение

$$\delta\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \text{Sp}_{\sigma'} \int \frac{d\mathbf{p}' d\mathbf{r}'}{(2\pi\hbar)^3} \widehat{F}(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta n(\mathbf{p}', \mathbf{r}'). \quad (4.56)$$

Как известно, в простейшем приближении самосогласованного поля Хартри, пренебрегающем квантовомеханическими обменными эффектами, для частиц, взаимодействующих с потенциальной энергией $v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$, функция \widehat{F} имеет следующий простой вид:

$$\widehat{F}_H(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|). \quad (4.57)$$

Выражение (4.57) соответствует приближению, не учитывающему корреляции частиц. Разность $\widehat{F} - \widehat{F}_H$ обусловлена корреляционными эффектами, простейшими из которых является эффект обменной корреляции, возникающий вследствие квантовой тождественности частиц.

В приближении самосогласованного поля Хартри эффект действия кулоновских сил сводится к дебаевскому экранированию электростатического взаимодействия. При неоднородном в пространстве распределении квазичастиц выражение (4.57) описывает потенциальную энергию квазичастицы в самосогласованном электрическом поле с потенциалом $\varphi(\mathbf{r})$:

$$e\varphi(\mathbf{r}) = \text{Sp}_{\sigma} \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{r}'}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \delta\widehat{n}(\mathbf{p}, \mathbf{r}'). \quad (4.58)$$

Потенциал самосогласованного поля $\varphi(\mathbf{r})$, как следует из (4.58), удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\begin{aligned} \nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) &= e \nabla^2 \int \frac{d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \text{Sp}_{\sigma} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \delta n(\mathbf{p}, \mathbf{r}') = \\ &= -4\pi e \text{Sp}_{\sigma} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \delta n(\mathbf{p}, \mathbf{r}). \end{aligned} \quad (4.59)$$

При однородном в пространстве распределении частиц выражение (4.58) расходится. Эта расходимость компенсируется однородным фоном зарядов противоположного знака, обеспечивающим электронейтральность системы в целом, что необходимо для возможности существования термодинамического равнове-

сия. Поэтому под $\delta\hat{n}$ следует понимать отклонение функции распределения от пространственно однородного значения.

Возможность использования положений теории нормальной ферми-жидкости для описания свойств систем заряженных фермионов определяется справедливостью следующего соотношения:

$$\hat{F}(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{r}, \mathbf{r}') - \hat{F}_H \approx \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') F(\mathbf{p}, \mathbf{p}'). \quad (4.60)$$

Для выявления условий справедливости приближенного равенства (4.60) следует сопоставить между собой радиус дебаевского экранирования кулоновского взаимодействия и среднее расстояние между фермионами. Это можно выполнить с помощью метода анализа размерностей.

В частности, для «свободных» электронов проводимости в реальных неферромагнитных металлах, где концентрация носителей составляет $n \leq 10^{23} \text{ см}^{-3}$, а их эффективная масса примерно равна массе свободного электрона, эти величины оказываются одинаковыми по порядку величины. Это означает, что в экранированном электрическом самосогласованном поле остающееся взаимодействие может быть описано с помощью выражения (4.60), если только выполняется принцип сохранения набора квантовых чисел, характеризующих состояния частиц при адиабатическом включении взаимодействия. Серьезным аргументом в пользу такого предположения является то обстоятельство, что в реальных металлах энергия плазмона $\hbar\omega_p$ оказывается больше, чем энергия Ферми электронов. Энергии частиц оказывается недостаточно для возбуждения плазменных колебаний, и роль дальнедействующих сил сводится к экранированию кулоновского взаимодействия без перестройки основного состояния системы. В этом случае выражение для энергии квазичастицы может быть записано в виде

$$\delta\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = -2\beta\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B} + e\varphi(\mathbf{r}) + \text{Sp}_{\sigma'} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \hat{F}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{p}', \mathbf{r}). \quad (4.61)$$

В этом выражении первое слагаемое в правой части появляется при наличии внешнего магнитного поля \mathbf{B} , не приводящего к квантованию движения частиц: β — магнитный момент электрона, а $\hat{\mathbf{S}}$ — совокупность спиновых матриц. Второе слагаемое в правой части (4.61) соответствует приближению самосогласованного поля Хартри. Для последнего слагаемого в правой части (4.61) можно использовать обычные разложения для корреляционной функции $\hat{F}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$.

7. Найти свободную энергию, энтропию и теплоемкость неподвижной квантовой бозе-жидкости при низких температурах, когда практически все имеющиеся в жидкости элементарные возбуждения являются фононами.

Решение. Ниже температуры бозе-эйнштейновской конденсации химический потенциал бозе-жидкости $\mu = 0$, поэтому свободная энергия F совпадает с термодинамическим потенциалом Ω :

$$F = \Omega + \mu N = \Omega = kT \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \ln \left(1 - e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} \right). \quad (4.62)$$

Используя выражение для функции распределения Бозе—Эйнштейна n при $\mu = 0$

$$n = \left(e^{\frac{\varepsilon}{kT}} - 1 \right)^{-1}, \quad (4.63)$$

переписываем выражение для F в виде

$$F = -kT \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \ln(1 + n). \quad (4.64)$$

Проинтегрировав соотношение (4.64) по частям и учитывая, что энергия квазичастиц зависит только от модуля импульса, получим

$$F = \frac{1}{3} kT \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{n+1} \frac{\partial n}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial p}. \quad (4.65)$$

Представим производную по энергии от функции распределения (4.63) в виде

$$\frac{\partial n}{\partial \varepsilon} = -\frac{1}{kT} n^2 e^{\frac{\varepsilon}{kT}} = -\frac{1}{kT} n(n+1).$$

Теперь выражение (4.65) принимает вид

$$F = -\frac{1}{3} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} p n \frac{\partial \varepsilon}{\partial p}. \quad (4.66)$$

Для фононного газа закон дисперсии квазичастиц записывается как $\varepsilon = up$, поэтому из (4.66) немедленно получаем

$$F = -\frac{1}{3} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \varepsilon n = -\frac{E_{\Phi}}{3},$$

где E_{Φ} — энергия единицы объема фононного газа, которая с помощью выражения для функции распределения (4.63) записывается как

$$E_{\Phi} = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \varepsilon \left(e^{\frac{\varepsilon}{kT}} - 1 \right)^{-1}.$$

Интегралы такого типа вычисляются с помощью соотношения

$$\int_0^{\infty} dx x^{\eta-1} (e^x - 1)^{-1} = \Gamma(\eta) \zeta(\eta) \quad (\eta > 1),$$

где $\Gamma(\eta)$ — гамма-функция, для которой справедливо представление $\Gamma(\eta) = \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^{\eta-1}$, а $\zeta(\eta)$ — дзета-функция Римана

$\zeta(\eta) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-\eta}$. В результате выражение (4.67) для E_{Φ} принимает вид

$$E_{\Phi} = \frac{4\pi^5}{15} \left(\frac{kT}{2\pi\hbar u} \right)^3 kT. \quad (4.67)$$

Число фононов в единице объема

$$n_{\Phi} = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} n = 8\pi \zeta(3) \left(\frac{kT}{2\pi\hbar u} \right)^3,$$

так что формулу (4.67) можно приближенно переписать в виде

$$E_{\Phi} \approx \frac{\pi^4}{36} n_{\Phi} kT.$$

Для энтропии S_{Φ} и теплоемкости C_{Φ} , используя обычные термодинамические соотношения, находим:

$$S_{\Phi} = -\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{16\pi^5}{45} k \left(\frac{kT}{2\pi\hbar u} \right)^3, \quad (4.68)$$

$$C_{\Phi} = T \frac{\partial S_{\Phi}}{\partial T} = \frac{16\pi^5}{15} k \left(\frac{kT}{2\pi\hbar u} \right)^3. \quad (4.69)$$

Фононный закон дисперсии $\varepsilon = up$ справедлив лишь тогда, когда длина волны квазичастицы $\frac{\hbar}{p}$ велика по сравнению с межатомными расстояниями. По мере увеличения импульса кривая $\varepsilon(p)$ отклоняется от линейной зависимости и определяется законом взаимодействия молекул жидкости. Поэтому термодинамические величины не могут быть вычислены в общем виде.

8. Найти свободную энергию, энтропию и теплоемкость неподвижной квантовой бозе-жидкости при температурах, ко-

гда доминирующая роль в формировании термодинамических свойств принадлежит ротонам.

Решение. При вычислении свободной энергии ротонного газа следует использовать закон дисперсии

$$\varepsilon = \Delta + \frac{(p - p_0)^2}{2m},$$

и учитывать, что импульсы ротонов по модулю близки к p_0 . Энергия ротона всегда содержит величину Δ , большую по сравнению с kT , при температурах, достаточно низких для того, чтобы можно было говорить о ротонном газе. Поэтому ротоны можно описывать статистикой Больцмана, а не статистикой Бозе—Эйнштейна. Но можно воспользоваться и выражением (4.64) для свободной энергии бозе-жидкости. Учитывая, что для ротонов $n \ll 1$, а $\ln(1 + n) \approx n$, получим:

$$F = -kT \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \ln(1 + n) = -kT \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} n = -kT n_p, \quad (4.70)$$

где концентрация ротонов n_p определяется выражением

$$n_p = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} n = \frac{2p_0^2 (mkT)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\Delta}{kT}}}{(2\pi\hbar^2)^{\frac{3}{2}}}. \quad (4.71)$$

С помощью соотношений (4.70) и (4.71) находим выражение для энтропии S_p и теплоемкость C_p ротонного газа

$$S_p = -\frac{\partial F}{\partial T} = kn_p \left(\frac{\Delta}{kT} + \frac{3}{2} \right),$$

$$C_p = T \frac{\partial S_p}{\partial T} = kn_p \left[\left(\frac{\Delta}{kT} \right)^2 + \frac{\Delta}{kT} + \frac{3}{4} \right]. \quad (4.72)$$

Обратим внимание на характерную температурную зависимость теплоемкости ротонного газа.

9. Рассматривая движение газа возбуждений в бозе-жидкости в двух системах отсчета — где неподвижна жидкость и где неподвижен газ возбуждений, — обосновать двухскоростную модель, согласно которой гелий II ведет себя как «смесь» двух жидкостей: одна нормальная с обычной вязкостью, а другая — сверхтекучая.

Решение. Пусть газ возбуждений движется относительно жидкости со скоростью \mathbf{v} . В системе отсчета, где газ возбуждений как целое покоится, жидкость движется со скоростью $-\mathbf{v}$.

Энергия E жидкости в этой системе отсчета связана с энергией E_0 в системе отсчета, где жидкость покоится, соотношением

$$E_0 = E - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} + \frac{Mv^2}{2}. \quad (4.73)$$

Здесь M — масса всей жидкости, а \mathbf{p} — ее импульс в системе, где энергия равна E .

Если в покоящейся жидкости появляется еще одно элементарное возбуждение с энергией $\varepsilon(\mathbf{p})$, то в системе отсчета, где жидкость движется со скоростью $-\mathbf{v}$, дополнительная энергия равна $\varepsilon(\mathbf{p}) - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}$. Именно такой энергией обладает возбуждение в системе отсчета, где жидкость движется со скоростью $-\mathbf{v}$, а газ возбуждений неподвижен. Функция распределения элементарных возбуждений имеет вид $n(\varepsilon - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v})$, где $n(\varepsilon)$ — функция распределения Бозе—Эйнштейна для газа возбуждений в состоянии равновесия. Полный импульс единицы объема газа элементарных возбуждений есть

$$\mathbf{p} = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{p} n(\varepsilon - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}). \quad (4.74)$$

При малой скорости движения газа возбуждений функцию $n(\varepsilon - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v})$ можно разложить по степеням $\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}$. Нулевой член разложения исчезает после интегрирования по \mathbf{p} , так как под интегралом стоит нечетная функция \mathbf{p} . Первый член разложения дает

$$\mathbf{p} = - \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{p} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}) \frac{dn(\varepsilon)}{d\varepsilon} \quad (4.75)$$

или, после усреднения по направлениям \mathbf{p} (при вычислении линейного по v члена это можно сделать, домножив подинтегральное выражение в (4.75) на косинус угла между \mathbf{p} и \mathbf{v}), получаем

$$\mathbf{p} = \frac{\mathbf{v}}{3} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \left(-\frac{dn}{d\varepsilon} \right) p^2. \quad (4.76)$$

Из (4.76) следует, что движение газа квазичастиц сопровождается переносом массы, причем эффективная масса единицы объема газа возбуждений равна коэффициенту пропорциональности между \mathbf{p} и \mathbf{v} .

При отличных от нуля температурах часть массы жидкости, увлекаемая движением квазичастиц, будет вести себя как нормальная вязкая жидкость и тормозиться в результате трения о стенки. Остальная масса жидкости будет вести себя как не обладающая вязкостью сверхтекучая жидкость. При этом между

этими движущимися друг сквозь друга частями жидкости нет внутреннего трения и не происходит взаимной передачи импульса, поскольку описанная картина соответствует термодинамическому равновесию в равномерно движущемся газе возбуждений: если какое-либо относительное движение возможно в состоянии теплового равновесия, то оно не сопровождается трением.

Такая ситуация позволяет развить двухскоростную модель сверхтекучей бозе-жидкости. В ней одновременно могут существовать два движения — сверхтекучее со скоростью \mathbf{v}_s и нормальное со скоростью \mathbf{v}_n , причем каждому из этих движений соответствует своя эффективная масса. Плотность ρ гелия записывается в виде

$$\rho = \rho_s + \rho_n, \quad (4.77)$$

где ρ_s и ρ_n — плотности сверхтекучей и нормальной частей жидкости. Полный импульс \mathbf{p} единицы объема также складывается из двух частей:

$$\mathbf{p} = \rho_n \mathbf{v}_n + \rho_s \mathbf{v}_s. \quad (4.78)$$

При абсолютном нуле температуры нормальная часть плотности $\rho_n = 0$: жидкость может совершать только сверхтекучее движение. При $T \neq 0$ в силу сказанного выше плотность ρ_n определяется формулой (4.76)

$$\rho_n = \frac{1}{3} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} p^2 \left(-\frac{dn}{d\varepsilon} \right). \quad (4.79)$$

По мере повышения температуры все большая часть массы жидкости становится нормальной. В точке, в которой достигается равенство $\rho_n = \rho$, полностью исчезает свойство сверхтекучести.

10. Используя соотношение (4.79), найдите фононный и ротонный вклады в нормальную плотность ρ_n .

Решение. Закон дисперсии фононов при низких температурах имеет вид $\varepsilon = up$, поэтому соотношение (4.79) после интегрирования по угловым переменным дает для фононного вклада выражение

$$(\rho_n)_\Phi = -\frac{4\pi}{3u} \int_0^\infty \frac{dn}{dp} \frac{p^4 dp}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (4.80)$$

Интегрируя (4.80) по частям, получаем

$$(\rho_n)_\Phi = \frac{16\pi}{3u} \int_0^\infty n \frac{p^3 dp}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{4\pi}{3u^2} \int \varepsilon n \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (4.81)$$

Получившийся интеграл представляет собой энергию единицы объема фоновго газа. Эта энергия вычисляется элементарно и в пренебрежении энергией нулевых колебаний

$$\frac{E_\Phi}{V} = \frac{\pi^2 T^4}{30 (\hbar u)^3}, \quad (4.82)$$

где температура T берется в энергетических единицах ($k = 1$). С учетом (4.82) имеем

$$(\rho_n)_\Phi = -\frac{4E_\Phi}{3u^2 V} = \frac{2\pi^2 T^4}{45\hbar^3 u^5}. \quad (4.83)$$

Как уже отмечалось в предыдущих задачах, для ротонов можно использовать распределение Больцмана. При этом $\frac{dn}{d\varepsilon} = -\frac{n}{T}$, и с помощью соотношения (4.79) имеем

$$(\rho_n)_p = \frac{1}{3T} \int p^2 n \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{\langle p^2 \rangle n_p}{3T}, \quad (4.84)$$

где $\langle p^2 \rangle$ — среднее значение квадрата импульса ротонов. Используя формулу (4.74) и полагая с хорошей точностью $\langle p^2 \rangle = p_0^2$, окончательно получаем

$$(\rho_n)_p = -\frac{2m^{\frac{1}{2}} p_0}{3(2\pi)^{\frac{3}{2}} T^{\frac{1}{2}} \hbar^3} e^{-\frac{\Delta}{T}}. \quad (4.85)$$

При самых низких температурах фоновый вклад превосходит ротонный. При температурах больше 0,6 К преобладает ротонный вклад.

Задачи для самостоятельного решения

11. Используя выражение для вариации квазичастичной энергии в магнитном поле

$$\delta\hat{\varepsilon}(\mathbf{p}) = -2\beta\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{B} + \text{Sp}_{\mathbf{p}' } \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \hat{F}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta\hat{n}(\mathbf{p}'),$$

где β — магнитный момент электрона, и определяя эффективный магнитный момент $\gamma(\mathbf{p})$ квазичастицы соотношением

$$\delta\varepsilon(\mathbf{p}) = -\gamma(\mathbf{p}) \mathbf{B},$$

получите в случае сферической ферми-поверхности соотношение

$$\gamma = \frac{\beta}{1 + B_0}.$$

12. Покажите, что для парамагнитной восприимчивости изотропной нормальной ферми-жидкости справедливо выражение

$$\chi = \chi_{\text{Паули}} \frac{1 + A_1}{1 + B_0},$$

где $\chi_{\text{Паули}} = \frac{mp_F}{\pi^2 \hbar^3} \beta^2$ — парамагнитная восприимчивость Паули для газа невзаимодействующих фермионов.

13. Покажите, что при очень низких температурах, когда всю массу жидкости можно считать сверхтекучей, а поверхностные колебания жидкости представляют собой капиллярные волны с законом дисперсии $\omega^2 = \sigma \frac{k^3}{\rho} \approx \sigma_0 \frac{k^3}{\rho}$, выражение для коэффициентов поверхностного натяжения σ (т.е. свободной энергии единицы площади поверхности жидкости) может быть представлено в виде

$$\sigma = \sigma_0 - \frac{T^{\frac{7}{3}} \rho^{\frac{2}{3}}}{4\pi \hbar^{\frac{4}{3}} \sigma_0^{\frac{2}{3}}} \Gamma\left(\frac{7}{3}\right) \zeta\left(\frac{7}{3}\right).$$

Глава 5

ТЕОРИЯ ФЛУКТУАЦИЙ

§ 5.1. Элементарный расчет флуктуаций

Флуктуациями физических величин называются их отклонения от средних значений, обусловленные тепловым движением частиц системы.

Основу элементарного расчета флуктуаций составляют положения теории вероятностей, согласно которым вероятность одновременного осуществления независимых событий равна произведению вероятностей каждого из них. На этом пути можно найти выражения для флуктуаций различных физических характеристик системы, в частности, распределение Пуассона, которое получается в ряде случаев в результате рассмотрения вопроса на основе более строгих соображений.

§ 5.2. Гауссова квазитермодинамическая теория флуктуаций

Различают термодинамические и квантовые флуктуации физических величин. Условием того, что флуктуация параметра x имеет термодинамический характер, является неравенство

$$kT \gg \frac{\hbar}{\tau}, \quad (5.1)$$

где τ — характерное время изменения параметра x . В этом случае плотность вероятности отклонения величины x от своего среднего значения, полагаемого равным нулю, имеет вид

$$w(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \exp\left(\frac{-\alpha x^2}{2}\right). \quad (5.2)$$

Распределение вида (5.2) называется гауссовым; оно нормировано на единицу:

$$\int_{-\infty}^{\infty} w(x) dx = 1,$$

а средний квадрат флуктуации

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 w(x) dx = \alpha^{-1}. \quad (5.3)$$

При рассмотрении одновременного отклонения от равновесных значений нескольких термодинамических величин x_1, \dots, x_n выражение для плотности вероятности имеет вид

$$w(x_1, \dots, x_n) = \frac{\sqrt{\alpha}}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \exp\left(\frac{-\alpha_{ik}x_i x_k}{2}\right), \quad (5.4)$$

где α — определитель, составленный из элементов симметричной матрицы $\alpha_{ik} = \alpha_{ki}$. Распределение (5.4) также нормировано на единицу:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots dx_n w(x_1 \dots x_n) = 1.$$

Для средних значений флуктуации справедливо равенство

$$\langle x_i x_j \rangle = \alpha_{ij}^{-1}, \quad (5.5)$$

где α_{ij}^{-1} — элемент матрицы, обратной α_{ij} .

Распределения Гаусса (5.2) и (5.4) получены при учете только квадратичных членов в разложении энтропии в ряд Тейлора около равновесного значения. Коэффициенты α_{ij} имеют смысл вторых производных от энтропии по x_i и x_j . Эти формулы позволяют вычислять только квадратичные по отклонениям термодинамических величин комбинации, например $\langle (\Delta V)^2 \rangle$, $\langle \Delta V \Delta T \rangle$ и т. д.

Рассмотрим флуктуации в системе, которая может обмениваться с термостатом энергией в форме теплопередачи и совершения работы (в статистической физике она описывается изотермо-изобарическим ансамблем). В этом случае средние значения давления p и температуры T определяются термостатом. В гауссовом приближении формула для плотности вероятности

в отсутствие внешних полей в системе с фиксированным числом частиц N может быть записана следующим образом:

$$w \sim \exp \frac{\Delta p \Delta V - \Delta T \Delta S}{2kT}. \quad (5.6)$$

При расчетах с помощью выражения (5.6) необходимо приводить экспоненту к гауссовой форме, содержащей любую пару термодинамических переменных, например V и T или p и S и т. д.

Общая формула для вероятности флуктуации неизолированной системы, контакт которой с термостатом может быть произвольным (термическим, материальным и т. д.), имеет вид

$$w \sim \exp \frac{\Delta p \Delta V - \Delta T \Delta S - \Delta \mu \Delta N}{2kT}. \quad (5.7)$$

В гауссовой теории флуктуации выбор переменных состояния системы, как и обычно в термодинамике, произволен, предполагается только малость относительных флуктуаций. В случае, когда относительные флуктуации не малы (например, в окрестности точек фазовых переходов II рода), гауссово приближение становится неприменимым.

§ 5.3. Статистическая теория флуктуаций

В статистической теории флуктуаций средние значения квадратов флуктуаций, как и любые средние значения физических величин, можно вычислять непосредственно с помощью статистических сумм или функции распределения. Например, в каноническом ансамбле удобно вычислять среднее значение квадрата флуктуации энергии системы. Используя формулу для статистической суммы Q

$$Q = \sum_l e^{-\beta E_l},$$

получаем в соответствии с правилом вычисления средних

$$\langle E \rangle \equiv E = \frac{1}{Q} \sum_l E_l e^{-\beta E_l} = \frac{1}{Q} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_l e^{-\beta E_l} = -\frac{1}{Q} \frac{\partial Q}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Q,$$

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Q} \sum_l E_l^2 e^{-\beta E_l} = \frac{1}{Q} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \sum_l e^{-\beta E_l} = \frac{1}{Q} \frac{\partial^2 Q}{\partial \beta^2}.$$

Теперь для дисперсии энергии $\langle (\Delta E)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$ имеем

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle = \frac{1}{Q} \frac{\partial^2 Q}{\partial \beta^2} - \left(\frac{1}{Q} \frac{\partial Q}{\partial \beta} \right)^2 = -\frac{\partial}{\partial \beta} \langle E \rangle. \quad (5.8)$$

Аналогично изложенному в рамках большого канонического ансамбля удобно вычислять средний квадрат флуктуации числа частиц $\langle(\Delta N)^2\rangle$:

$$\langle(\Delta N)^2\rangle = \langle N^2\rangle - \langle N\rangle^2 = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle N\rangle}{\partial \mu}. \quad (5.9)$$

В изотермо-изобарическом ансамбле удобно находить средний квадрат флуктуации объема:

$$\langle(\Delta V)^2\rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle V\rangle}{\partial \mu}. \quad (5.10)$$

Статистический ансамбль определяется набором параметров, зависящих от физических условий, в которых находится система. Эти параметры при заданных условиях по определению флуктуировать не могут, поэтому флуктуирующие параметры нельзя выбирать произвольно. В результате при некоторых выборах параметров гауссова теория флуктуаций приводит к расхождению со статистической теорией.

§ 5.4. Описание динамических систем с флуктуирующими параметрами

При рассмотрении броуновского движения взвешенной частицы используется метод Ланжевена, в котором проекция уравнения движения на некоторое направление записывается в виде

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{1}{B} \frac{dx}{dt} + F(t) \quad \text{или} \quad m \frac{dv}{dt} = -\frac{v}{B} + F(t), \quad (5.11)$$

где m — масса броуновской частицы, v/B — сила трения, пропорциональная скорости, $F(t)$ — случайная (стохастическая) сила, обладающая свойствами

$$\langle F(t)\rangle = 0, \quad (5.12)$$

$$\langle F(t+\tau)F(t)\rangle = C\delta(\tau). \quad (5.13)$$

Здесь угловыми скобками обозначено усреднение по ансамблю реализаций функций F . Функция $\langle F(t+\tau)F(t)\rangle$ определяет степень статистической независимости величин $F(t+\tau)$ и $F(t)$ и называется корреляционной функцией. Ее можно представить также в виде

$$\langle F(t+\tau)F(t)\rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^{\infty} F(t+\tau)F(t) dt. \quad (5.14)$$

Соотношение (5.13) соответствует простейшему приближению для корреляционной функции (так называемый белый шум), когда $F(t)$ и $F(t + \tau)$ статистически независимы при $\tau \neq 0$. При этом

$$C = \frac{2kT}{B}. \quad (5.15)$$

Стохастическую величину $F(t)$ можно представить в виде интеграла Фурье:

$$F(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} F(\omega) e^{-i\omega t}. \quad (5.16)$$

При этом формула для обратного преобразования, определяющая спектральную плотность величины F , имеет вид

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt F(t) e^{i\omega t}.$$

В силу вещественности физической величины $F(t)$ справедливо

$$F(\omega) = F^* (-\omega). \quad (5.17)$$

Для однородного во времени стационарного процесса

$$\langle F(t_1)F(t_2) \rangle = D(t_1 - t_2).$$

При этом функция $D(t)$, соответствующая физически осмысленному поведению корреляционной функции случайного процесса, имеет вид

$$D(t) = D(0) e^{-\gamma|t|} \quad (\gamma > 0). \quad (5.18)$$

Для стационарного случайного процесса справедливо

$$\langle F(\omega)F(\omega_1) \rangle = 2\pi J(\omega)\delta(\omega + \omega_1).$$

В этом случае спектральная плотность $J(\omega)$, даваемая формулой

$$D(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} J(\omega) e^{-i\omega t}, \quad (5.19)$$

есть

$$J(\omega) = J(0) \frac{\gamma^2}{\omega^2 + \gamma^2}, \quad \text{где } J(0) = \frac{2D(0)}{\gamma}. \quad (5.20)$$

Из (5.20) видно, что при увеличении времени корреляции ($\gamma \rightarrow 0$) в спектральной плотности $J(\omega)$ остается одна линия $\omega = 0$:

$$J(\omega) |_{\gamma \rightarrow 0} \rightarrow 2\pi D(0) \delta(\omega). \quad (5.21)$$

В противоположном случае $\gamma \rightarrow \infty$ спектральная плотность для конечного интервала частот $\Delta\omega \ll \gamma$ превращается в константу:

$$J(\omega) \approx J(0). \quad (5.22)$$

Задачи

1. Идеальный газ, состоящий из N молекул, равномерно распределен в сосуде объемом V_0 , так что среднее число молекул n в объеме V равно $n = N \frac{V}{V_0}$. Определите вероятность того, что в объеме V при условии $V \ll V_0$ будет находиться $\nu \neq n$ молекул. Рассмотрите предельные случаи: а) $\nu \ll N$; б) $\nu \gg 1$, $\Delta\nu = \nu - n \ll n$. Сравните между собой значения $\langle \nu^2 \rangle$ во всех трех случаях.

Решение. По правилу нахождения вероятностей одновременного осуществления независимых событий найдем вероятность P_ν того, что ν каких-либо определенных молекул находится в объеме V , а остальные $(N - \nu)$ молекул находятся в объеме $(V_0 - V)$:

$$P_\nu = \left(\frac{V}{V_0}\right)^\nu \left(1 - \frac{V}{V_0}\right)^{N-\nu}. \quad (5.23)$$

Чтобы найти вероятность P_N^ν того, что любые ν молекул находятся в объеме V , а остальные $(N - \nu)$ молекул в объеме $(V_0 - V)$, нужно умножить (5.23) на число способов C_N^ν , которыми можно выбрать ν молекул из их общего числа N :

$$C_N^\nu = \frac{N!}{(N - \nu)! \nu!}. \quad (5.24)$$

В результате для P_N^ν получаем:

$$P_N^\nu = \frac{N!}{(N - \nu)! \nu!} \left(\frac{V}{V_0}\right)^\nu \left(1 - \frac{V}{V_0}\right)^{N-\nu}. \quad (5.25)$$

Выражение (5.25) называется биномиальным распределением. Рассмотрим предельные случаи.

а). При $\nu \ll N$ формулу биномиального распределения можно упростить, так как с учетом равенства $n = N \frac{V}{V_0}$ имеем:

$$P_N^\nu \equiv \frac{N(N-1)\dots(N-\nu+1)}{\nu!} \left(\frac{n}{N}\right)^\nu \left(1 - \frac{n}{N}\right)^{N-\nu} \approx \frac{n^\nu}{\nu!} \left(1 - \frac{n}{N}\right)^N.$$

При $N \rightarrow \infty$ это выражение принимает вид:

$$P(\nu) = \lim_{N \rightarrow \infty} P_N^\nu = \frac{n^\nu}{\nu!} e^{-n}. \quad (5.26)$$

Соотношение (5.26) называется распределением Пуассона. Легко убедиться, что вероятность $P(\nu)$ формально нормирована на единицу:

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} P(\nu) = 1.$$

б). Этот случай соответствует асимптотическому выражению для формулы Пуассона, когда среднее число частиц n в выделенном объеме V велико, так что $\nu \sim n \gg 1$ и $\Delta\nu = \nu - n \ll n$. При больших значениях ν для $\nu!$ можно воспользоваться формулой Стирлинга:

$$\ln(\nu!) \approx \nu \ln \nu - \nu.$$

Логарифмируем формулу Пуассона (5.26), имеем:

$$\ln P(\nu) = \nu \ln n - n - \nu \ln \nu + \nu = -(n + \Delta\nu) \ln \left(1 + \frac{\Delta\nu}{n}\right) + \Delta\nu, \quad (5.27)$$

Раскладывая в ряд логарифм и, ограничиваясь членами второго порядка по малому параметру $\frac{\Delta\nu}{n}$, находим

$$\ln P(\nu) \approx \frac{(\Delta\nu)^2}{2n} - \frac{(\Delta\nu)^2}{n} = -\frac{(\Delta\nu)^2}{2n}. \quad (5.28)$$

Равенство (5.28) приводит к распределению Гаусса:

$$P(\nu) \sim e^{-\frac{(\Delta\nu)^2}{2n}} = e^{-\frac{(\nu-n)^2}{2n}}.$$

Поскольку при $\nu \gg 1$ можно рассматривать ν как непрерывную переменную, $P(\nu)$ имеет смысл плотности вероятности. Вследствие острого максимума $P(\nu)$ при значении $\nu = n$ можно считать пределы изменения этой функции неограниченными:

$$-\infty < \nu < \infty.$$

Тогда из условия нормировки получаем:

$$P(\nu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi n}} e^{-\frac{(\nu-n)^2}{2n}}. \quad (5.29)$$

Нетрудно убедиться, что значения $\langle \nu^2 \rangle$ для всех трех распределений — биномиального (5.25), пуассоновского (5.26) и гауссова (5.29) — одинаковы.

2. При термоэлектронной эмиссии происходит вылет электронов с поверхности металла или полупроводника. Предполагается, что вылеты отдельных электронов происходят независимо друг от друга, и вероятность вылета одного электрона за малый промежуток времени dt равна $P_1(dt) = \lambda dt$ (λ — постоянная величина). Найдите вероятность $P_n(t)$ вылета n электронов за время t .

Решение. Обозначим вероятность того, что за время t не вылетит ни одного электрона, через $P_0(t)$. Тогда, учитывая независимость вылета отдельных электронов и правило подсчета двух последовательных событий, имеем:

$$\begin{aligned} P_n(t + dt) &= P_{n-1}(t) P_1(dt) + P_n(t) (1 - P_1(dt)), \\ P_0(t + dt) &= P_0(t) (1 - P_1(dt)). \end{aligned} \quad (5.30)$$

При составлении (5.30) учтено, что за время dt может вылететь только один электрон. Разложим левые части уравнений (5.30) в ряды Тейлора по степеням dt и устремим $dt \rightarrow 0$. Получим

$$\begin{aligned} \frac{dP_n(t)}{dt} &= \lambda (P_{n-1}(t) - P_n(t)), \\ \frac{dP_0(t)}{dt} &= -\lambda P_0(t). \end{aligned} \quad (5.31)$$

Систему уравнений (5.31) следует решать с начальными условиями, которые естественно задать в виде

$$P_n(0) = \begin{cases} 1, & n = 0 \\ 0, & n \neq 0 \end{cases}. \quad (5.32)$$

Решение второго уравнения системы (5.31) при учете (5.32) имеет вид

$$P_0(t) = e^{-\lambda t}. \quad (5.33)$$

После этого уравнение для $P_1(t)$ записывается в виде:

$$\frac{dP_1(t)}{dt} = \lambda e^{-\lambda t} - P_1(t). \quad (5.34)$$

Решение неоднородного уравнения (5.34) при начальном условии (5.32) для $n = 1$ приводит к результату

$$P_1(t) = \lambda t e^{-\lambda t}. \quad (5.35)$$

Дальше с помощью (5.31) записывается уравнение для $P_2(t)$, в котором роль неоднородности играет произведение $\lambda P_1(t)$,

и так далее. С помощью метода математической индукции нетрудно показать, что решение уравнения для $P_n(t)$ имеет вид

$$P_n(t) = \frac{(\lambda t)^n}{n!} e^{-\lambda t}. \quad (5.36)$$

Видно, что (5.36) — это распределение Пуассона, рассмотренное в предыдущей задаче.

3. Найдите среднее значение квадрата флуктуаций для числа вылетающих при термоэлектронной эмиссии электронов, если в единицу времени в среднем вылетает n_0 электронов.

Решение. Среднее значение квадрата флуктуаций определяется выражением

$$\langle (\Delta n)^2 \rangle = \langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle. \quad (5.37)$$

Раскрывая выражения, стоящие в правой части (5.37), находим

$$\langle (\Delta n)^2 \rangle = \langle n^2 \rangle - 2\langle n \rangle \langle n \rangle + \langle n \rangle^2 = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2. \quad (5.38)$$

Вычисляем входящие в правую часть (5.38) величины с помощью функции распределения вероятностей, полученной в предыдущей задаче. Имеем

$$\begin{aligned} \langle n^2 \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} n^2 P_n(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n^2 (\lambda t)^n}{n!} e^{-\lambda t} = e^{-\lambda t} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n (\lambda t)^n}{(n-1)!} = \\ &= e^{-\lambda t} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(\lambda t)^n}{(n-2)!} + e^{-\lambda t} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\lambda t)^n}{(n-1)!} = \\ &= e^{-\lambda t} \left((\lambda t)^2 e^{\lambda t} + \lambda t e^{\lambda t} \right) = (\lambda t)^2 + \lambda t. \end{aligned} \quad (5.39)$$

Аналогично:

$$\begin{aligned} \langle n \rangle^2 &= \left(\sum_{n=0}^{\infty} n P_n(t) \right)^2 = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{n (\lambda t)^n}{n!} e^{-\lambda t} \right)^2 = \\ &= \left(e^{-\lambda t} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\lambda t)^n}{(n-1)!} \right)^2 = (e^{-\lambda t} \lambda t e^{\lambda t})^2 = (\lambda t)^2. \end{aligned} \quad (5.40)$$

С помощью соотношений (5.38)–(5.40) находим

$$\langle (\Delta n)^2 \rangle = \lambda t. \quad (5.41)$$

Но из соотношения (5.40) видно, что

$$\langle n \rangle = \lambda t. \quad (5.42)$$

С другой стороны, $\langle n \rangle = n_0 t$, поэтому с помощью (5.41) и (5.42) получаем

$$\langle (\Delta n)^2 \rangle = n_0 t.$$

4. Частицы некоторой среды, подчиняющиеся законам классической механики, могут обмениваться энергией с окружающей средой (термостатом), но не друг с другом. Покажите, что дисперсия числа частиц описывается распределением Пуассона.

Решение. Нахождение дисперсии числа частиц подразумевает, что число частиц в системе может изменяться. Такие системы описываются большим каноническим ансамблем.

В большом каноническом ансамбле в соответствии с выражением (2.10) вероятность P_N того, что в системе находится N частиц, определяется выражением

$$P_N = c \sum_{\{N_l=N\}} \exp\left(\frac{\mu N_l - E_l}{kT}\right), \quad (5.43)$$

где c — нормировочная постоянная, а суммирование проводится по всем состояниям l системы, для которых $N_l = N$. Выражение (5.43) можно записать в ином виде, если использовать выражение для статистической суммы Q_N в каноническом ансамбле:

$$Q_N = \sum_l \exp\left(-\frac{E_l}{kT}\right) = \frac{1}{h^{3N} N!} \int d\Gamma e^{-\frac{H}{kT}}. \quad (5.44)$$

При этом выражение (5.42) принимает вид

$$P_N = C \exp\left(\frac{\mu N}{kT}\right) Q_N. \quad (5.45)$$

В отсутствие взаимодействия частиц друг с другом функция Гамильтона H распадается на сумму функций Гамильтона отдельных частиц. Поэтому статистический интеграл в правой части (5.44) превращается в произведение статистических интегралов для одной частицы.

$$Q_1 = \frac{1}{h} \int d\Gamma_1 e^{-\frac{H_1(\vec{r}_1, \vec{p}_1)}{kT}}, \quad (5.46)$$

так что соотношение (5.44) переписывается следующим образом:

$$P_N = C \exp\left(\frac{\mu N}{kT}\right) \frac{Q_1^N}{N!}. \quad (5.47)$$

Это соотношение можно переписать в виде

$$P_N = C \frac{\langle N \rangle^N}{N!}, \quad (5.48)$$

где

$$\langle N \rangle = \exp\left(\frac{\mu}{kT}\right) Q_1.$$

Нормировка соотношения (5.48) на единицу приводит к следующему выражению для константы C :

$$C = \exp(-\langle N \rangle). \quad (5.49)$$

Окончательно выражение для P_N записывается в следующем виде:

$$P_N = \frac{\langle N \rangle^N}{N!} e^{-\langle N \rangle}. \quad (5.50)$$

Это распределение Пуассона.

5. Вычислить флуктуации термодинамических величин $\langle(\Delta T)^2\rangle$, $\langle(\Delta V)^2\rangle$, $\langle(\Delta S)^2\rangle$, $\langle(\Delta p)^2\rangle$, $\langle\Delta V\Delta T\rangle$, $\langle\Delta T\Delta p\rangle$, $\langle\Delta V\Delta p\rangle$, $\langle\Delta p\Delta S\rangle$, $\langle\Delta S\Delta V\rangle$ и $\langle\Delta S\Delta T\rangle$, считая независимыми переменными параметры V и T .

Решение. Используя гауссову теорию флуктуаций, выразим в формуле (5.6) величины ΔS и Δp через флуктуации независимых переменных V и T :

$$\begin{aligned} \Delta S &= \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T \Delta V + \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V \Delta T, \\ \Delta p &= \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T \Delta V + \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \Delta T. \end{aligned} \quad (5.51)$$

С помощью равенства $dF = -SdT - pdV$ имеем $\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V$. Далее, $\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = \frac{C_V}{T}$. Подставляя эти значения в (5.51), имеем

$$\Delta S = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \Delta V + \frac{C_V}{T} \Delta T.$$

Теперь выражение для плотности вероятности (5.6) после подстановки найденных выражений для ΔS и Δp принимает гауссов вид в переменных V и T :

$$w \sim \exp\left[-\frac{C_V}{2kT^2} (\Delta T)^2 + \frac{1}{2kT} \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T (\Delta V)^2\right]. \quad (5.52)$$

Из (5.52) видно, что плотность вероятности распалась на произведение множителей, зависящих только от ΔT и ΔV . Это означает, что флуктуации температуры и объема статистически независимы:

$$\langle\Delta V\Delta T\rangle = 0. \quad (5.53)$$

Сравнивая (5.52) с соотношением (5.3), находим

$$\langle (\Delta T)^2 \rangle = \frac{kT^2}{C_V}, \quad (5.54)$$

$$\langle (\Delta V)^2 \rangle = -kT \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T. \quad (5.55)$$

Для вычисления средних значений комбинаций, содержащих одну из выбранных независимых переменных, удобно выразить флуктуации второй величины через ΔV и ΔT . Тогда получим, например, для $\langle \Delta T \Delta p \rangle$

$$\langle \Delta T \Delta p \rangle = \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T \langle \Delta T \Delta V \rangle + \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \langle (\Delta T)^2 \rangle.$$

Подставляя сюда соотношения (5.53) и (5.54), найдем

$$\langle \Delta T \Delta p \rangle = \frac{kT^2}{C_V} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V. \quad (5.56)$$

Аналогично

$$\langle \Delta V \Delta p \rangle = \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T \langle (\Delta V)^2 \rangle + \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \langle \Delta V \Delta T \rangle.$$

Подставляя (5.53) и (5.55), имеем

$$\langle \Delta V \Delta p \rangle = -kT. \quad (5.57)$$

Далее,

$$\begin{aligned} \langle \Delta S \Delta V \rangle &= \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T \langle (\Delta V)^2 \rangle + \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V \langle \Delta V \Delta T \rangle = \\ &= -kT \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V = kT \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p. \end{aligned} \quad (5.58)$$

Для вычисления флуктуации $\langle (\Delta S)^2 \rangle$, $\langle (\Delta p)^2 \rangle$, и $\langle \Delta p \Delta S \rangle$, можно выразить их через ΔV и ΔT . Например,

$$\langle (\Delta S)^2 \rangle = \left\langle \left[\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \Delta V + \frac{C_V}{T} \Delta T \right]^2 \right\rangle.$$

Раскрывая квадрат суммы и учитывая формулы (5.53)–(5.55), найдем

$$\langle (\Delta S)^2 \rangle = - \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V^2 \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T kT + \frac{C_V^2}{T^2} kT^2.$$

Учитывая соотношение

$$C_p - C_V = -T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V^2 \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T, \quad (5.59)$$

окончательно получаем

$$\langle (\Delta S)^2 \rangle = kC_p. \quad (5.60)$$

Аналогично

$$\begin{aligned} \langle (\Delta p)^2 \rangle &= \left\langle \left[\left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T \Delta V + \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \Delta T \right]^2 \right\rangle = \\ &= -kT \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T + \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \frac{kT^2}{C_V}. \end{aligned} \quad (5.61)$$

С помощью (5.59) имеем

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V = -\frac{C_p - C_V}{T} \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T.$$

Подставим это выражение в (5.61) и приведем подобные члены:

$$\langle (\Delta p)^2 \rangle = -kT \frac{C_p}{C_V} \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T = -kT \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_S. \quad (5.62)$$

Наконец,

$$\begin{aligned} \langle \Delta p \Delta S \rangle &= \left\langle \left[\left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T \Delta V + \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \Delta T \right] \left[\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \Delta V + \frac{C_V}{T} \Delta V \right] \right\rangle = \\ &= \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \langle (\Delta V)^2 \rangle + \frac{C_V}{T} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \langle (\Delta T)^2 \rangle. \end{aligned}$$

Подставляя сюда (5.54) и (5.55), приходим к равенству

$$\langle \Delta p \Delta S \rangle = 0. \quad (5.63)$$

6. Вычислить флуктуации $\langle (\Delta p)^2 \rangle$, $\langle (\Delta S)^2 \rangle$ и $\langle \Delta p \Delta S \rangle$, считая независимыми переменными параметрами p и S .

Решение. Выразим в (5.6) величины ΔV и ΔT через флуктуации независимых переменных p и S :

$$\begin{aligned} \Delta V &= \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_S \Delta p + \left(\frac{\partial V}{\partial S} \right)_p \Delta S, \\ \Delta T &= \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_S \Delta p + \left(\frac{\partial T}{\partial S} \right)_p \Delta S. \end{aligned} \quad (5.64)$$

С помощью соотношения $dH = TdS + Vdp$ имеем $\left(\frac{\partial V}{\partial S} \right)_p = -\left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_S$. Далее, $\left(\frac{\partial T}{\partial S} \right)_p = \frac{T}{C_p}$. Поэтому второе равенство из (5.64) переписывается в виде

$$\Delta T = \left(\frac{\partial V}{\partial S} \right)_p \Delta p + \frac{T}{C_p} \Delta S.$$

Подстановка полученных выражений в (5.6) дает

$$w \sim \exp \left[\frac{1}{2kT} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_S (\Delta p)^2 - \frac{1}{2kC_p} (\Delta S)^2 \right]. \quad (5.65)$$

Из (5.65) следуют равенства

$$\langle \Delta S \Delta p \rangle = 0, \quad \langle (\Delta p)^2 \rangle = -kT \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_S, \quad \langle (\Delta S)^2 \rangle = kC_p.$$

7. Вычислить флуктуации $\langle (\Delta V)^2 \rangle$, $\langle (\Delta S)^2 \rangle$ и $\langle \Delta V \Delta S \rangle$, считая независимыми переменными V и S .

Решение. Как и раньше, выразим в (5.6) величины Δp и ΔT через флуктуации независимых переменных V и S :

$$\begin{aligned} \Delta p &= \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_S \Delta V + \left(\frac{\partial p}{\partial S} \right)_V \Delta S, \\ \Delta T &= \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_S \Delta V + \left(\frac{\partial T}{\partial S} \right)_V \Delta S. \end{aligned}$$

Используя фундаментальное равенство Гиббса $dE = TdS - pdV$ и соотношение $\left(\frac{\partial T}{\partial S} \right)_V = \frac{T}{C_V}$, перепишем выражение для ΔT в виде

$$\Delta T = - \left(\frac{\partial p}{\partial S} \right)_V \Delta V + \frac{T}{C_V} \Delta S.$$

Теперь для w с помощью (5.6) получаем

$$w \sim \exp \left[\frac{1}{2kT} \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_S (\Delta V)^2 + \frac{1}{kT} \left(\frac{\partial p}{\partial S} \right)_V \Delta S \Delta V - \frac{1}{2kC_V} (\Delta S)^2 \right].$$

В отличие от предыдущих задач, выражение для w в данном случае не распадается на произведение множителей, зависящих только от ΔV и ΔS , поскольку показатель экспоненты содержит слагаемое, пропорциональное $\Delta S \Delta V$. Это означает, что флуктуации $\langle \Delta S \Delta T \rangle$ не равны нулю. В соответствии с формулой (5.5) в данном случае необходимо обратить матрицу

$$\{\alpha_{ij}\} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{kT} \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_S & -\frac{1}{kT} \left(\frac{\partial p}{\partial S} \right)_V \\ -\frac{1}{kT} \left(\frac{\partial p}{\partial S} \right)_V & \frac{1}{kC_V} \end{pmatrix}.$$

Обычное вычисление дает для обратной матрицы

$$\{\alpha_{ij}^{-1}\} = -(kT)^2 \left[\frac{T}{C_V} \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_S + \left(\frac{\partial p}{\partial S} \right)_V^2 \right]^{-1} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} \frac{1}{kC_V} & \frac{1}{kT} \left(\frac{\partial p}{\partial S} \right)_V \\ \frac{1}{kT} \left(\frac{\partial p}{\partial S} \right)_V & -\frac{1}{kT} \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_S \end{pmatrix}. \quad (5.66)$$

Используя (5.66), в соответствии с (5.5) имеем

$$\begin{aligned} \langle (\Delta V)^2 \rangle &= - \left[\frac{T}{C_V} \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_S + \left(\frac{\partial p}{\partial S} \right)_V^2 \right]^{-1} \frac{kT}{C_V}. \\ \langle (\Delta S)^2 \rangle &= kT \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_S \left[\frac{T}{C_V} \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_S + \left(\frac{\partial p}{\partial S} \right)_V^2 \right]^{-1}. \\ \langle \Delta S \Delta V \rangle &= - \left[\frac{T}{C_V} \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_S + \left(\frac{\partial p}{\partial S} \right)_V^2 \right]^{-1} kT \left(\frac{\partial p}{\partial S} \right)_V. \end{aligned} \quad (5.67)$$

Видно, что «неудачный» выбор независимых переменных приводит к довольно громоздким выражениям, которые, естественно, приводятся к (5.55), (5.60) и (5.58) тождественными термодинамическими преобразованиями. Прежде всего обратим внимание на то, что знаменатель в этих формулах может быть записан в виде якобиана

$$\frac{T}{C_V} \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_S + \left(\frac{\partial p}{\partial S} \right)_V^2 = \left(\frac{T, p}{S, V} \right),$$

в чем легко убедиться, раскрывая это равенство справа налево и учитывая, что $\left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_S = - \left(\frac{\partial p}{\partial S} \right)_V$. Теперь, например, для $\langle (\Delta V)^2 \rangle$ получаем выражение, совпадающее с (5.55):

$$\begin{aligned} \langle (\Delta V)^2 \rangle &= - \left[T \frac{\partial(S, T)}{\partial(T, V)} \frac{\partial(T, p)}{\partial(S, V)} \right]^{-1} kT^2 = \\ &= - \frac{kT}{\frac{\partial(T, p)}{\partial(T, V)}} = -kT \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T. \end{aligned}$$

Совершенно аналогично преобразуются и остальные два выражения (5.67).

8. Вычислить средний квадрат флуктуации энергии в рамках гауссовой теории флуктуации и сравнить полученный результат с формулой (5.8).

Решение. Выберем в качестве независимых переменных V и T . Тогда для ΔE имеем

$$\Delta E = \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_T \Delta V + \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V \Delta T.$$

Возводя это выражение в квадрат и учитывая, что флуктуации объема и температуры независимы ($\langle \Delta V \Delta T \rangle = 0$), получаем

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle = \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_T^2 \langle (\Delta V)^2 \rangle + \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V^2 \langle (\Delta T)^2 \rangle. \quad (5.68)$$

Учитывая, что $\langle (\Delta V)^2 \rangle = -kT \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T$, $\langle (\Delta T)^2 \rangle = \frac{kT^2}{C_V}$, и используя соотношения

$$\left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = C_V, \quad \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_T = T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V - p,$$

получаем

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle = -kT \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T \left[T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V - p \right]^2 + kT^2 C_V. \quad (5.69)$$

Перепишем формулу (5.8) тождественно следующим образом:

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \langle E \rangle = kT^2 C_V, \quad (5.70)$$

поскольку производная по β в (5.8) вычисляется при фиксированном объеме в соответствии с определением канонического ансамбля.

Видно, что формула (5.69) содержит лишнее слагаемое по сравнению с формулой (5.70). Дело в том, что соотношение (5.68) определяет флуктуацию энергии системы в результате как флуктуации температуры, так и объема. В формуле (5.70) флуктуации объема не фигурируют вследствие того, что в каноническом ансамбле объем системы фиксирован. Чтобы в рамках такого подхода прийти к формуле (5.69), следует использовать изотермо-изобарический ансамбль.

Полученный в задаче результат имеет общий характер. Флуктуации, вычисляемые в рамках определенного ансамбля статистической физики, соответствуют условиям, в которых находится рассматриваемая система в данном ансамбле. В этом смысле формула (5.6) соответствует изотермо-изобарическому ансамблю, так как в ней не учитываются только флуктуации числа частиц в системе.

9. Получить соотношение (5.69) для флуктуации энергии, используя изотермо-изобарический ансамбль.

Решение. В рамках изотермо-изобарического ансамбля выражение для $\langle E \rangle$ дается формулой

$$\langle E \rangle = \frac{1}{P} \sum_{l,V} E_l e^{-\beta(E_l + pV)}, \quad (5.71)$$

где статистическая сумма P есть

$$P = \sum_{l,V} e^{-\beta(E_l + pV)}.$$

Дифференцирование выражения (5.71) для $\langle E \rangle$ по β и p приводит к соотношениям

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} &= -\langle E^2 \rangle - p \langle EV \rangle + \langle E \rangle^2 + p \langle E \rangle \langle V \rangle = \\ &= -\langle (\Delta E)^2 \rangle - p \langle \Delta E \Delta V \rangle, \quad (5.72) \\ \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial p} &= -\beta \langle EV \rangle + \beta \langle E \rangle \langle V \rangle = -\beta \langle \Delta E \Delta V \rangle. \end{aligned}$$

Умножая второе из уравнений (5.72) на $\frac{p}{\beta}$ и вычитая полученное произведение из первого уравнения, получаем

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle = -\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} + \frac{p}{\beta} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial p}.$$

Вводя обозначение $\langle E \rangle \equiv E$ и переходя к $T = \frac{1}{\beta k}$, получаем

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle = kT^2 \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_p + kTp \left(\frac{\partial E}{\partial p} \right)_T. \quad (5.73)$$

Используя фундаментальное равенство Гиббса для системы с постоянным числом частиц $dE = TdS - pdV$, перепишем (5.73) в виде

$$\begin{aligned} \langle (\Delta E)^2 \rangle &= -kT^2 p \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p + kT^3 \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p - \\ &\quad - kT^2 p \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T + kT^2 p \left(\frac{\partial S}{\partial p} \right)_T. \quad (5.74) \end{aligned}$$

Воспользуемся формулой $C_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p$ и соотношением (5.59) между C_p и C_V и учтем равенство $\left(\frac{\partial S}{\partial p} \right)_T = - \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p$, следую-

щее из соотношения $d\Phi = -SdT + Vdp$. Тогда (5.74) переписывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle (\Delta E)^2 \rangle &= \\ &= kT \left[TC_V - T^2 \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T - p^2 \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T - 2Tp \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \right]. \end{aligned}$$

В последнем слагаемом в правой части производную $\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p$ записываем в виде $\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p = - \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V$. В результате для флуктуации энергии имеем

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle = kT^2 C_V - kT \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \left[T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V - p \right]^2,$$

что совпадает с формулой (5.69).

10. Вычислить среднее значение $\langle (\Delta E)^3 \rangle$.

Решение. Прежде всего отметим, что искомую величину нельзя находить в рамках квазитермодинамической теории флуктуации, поскольку фигурирующий в этой теории гауссов интеграл соответствует учету только квадратичных отклонений энтропии системы от ее равновесного значения. Поэтому вычисление следует проводить с помощью функции распределения в подходящем ансамбле равновесной статистической физики.

Каким же ансамблем воспользоваться? Проще всего вычисления будут выглядеть в каноническом ансамбле: в микроканоническом ансамбле флуктуации энергии отсутствуют, а во всех остальных ансамблях флуктуирует большее число параметров, чем в каноническом ансамбле. Итак, нас интересует величина $\langle (E - \langle E \rangle)^3 \rangle$, которая в каноническом ансамбле вычисляется следующим образом. Перепишем формулу (5.8) в виде

$$\begin{aligned} - \langle (\Delta E)^2 \rangle &= \frac{\partial}{\partial \beta} \langle E \rangle = - \left(\sum_l e^{-\beta E_l} \right)^{-1} \sum_l E_l^2 e^{-\beta E_l} + \\ &+ \left[\left(\sum_l e^{-\beta E_l} \right)^{-1} \sum_l E_l e^{-\beta E_l} \right]^2 \end{aligned}$$

и продифференцируем это выражение по β . Учитывая, что получающиеся выражения соответствуют средним значениям разных

степеней энергии, можно записать результат так:

$$\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \langle E \rangle = \langle E^3 \rangle - \langle E^2 \rangle \langle E \rangle - 2 \langle E \rangle \langle E^2 \rangle + 2 \langle E \rangle^3.$$

Легко видеть, что правая часть этого выражения равна $\langle (E - \langle E \rangle)^3 \rangle$. Поэтому можно написать

$$\langle (E - \langle E \rangle)^3 \rangle = \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \langle E \rangle.$$

Разумеется, при вычислении $\langle (\Delta E)^3 \rangle$ в различных ансамблях будут получаться разные результаты.

11. Найдите средний квадрат флуктуации энергии системы N одинаковых одномерных невзаимодействующих между собой осцилляторов с собственной частотой ω . Исследуйте поведение этой величины при высоких температурах: $\hbar\omega \ll kT$.

Решение. $\langle (\Delta E)^2 \rangle$ можно найти с помощью формулы (5.8) и выражения (2.33) для внутренней энергии системы таких осцилляторов, равной среднему значению $\langle E \rangle$ энергии системы. Имеем в соответствии с (2.33)

$$\langle E \rangle = N \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{\exp(\beta\hbar\omega) - 1} \right). \quad (5.75)$$

Вычисляя средний квадрат флуктуации энергии с помощью (5.75), найдем

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \frac{N\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} = N(\hbar\omega)^2 \frac{\exp(\beta\hbar\omega)}{(\exp(\beta\hbar\omega) - 1)^2}. \quad (5.76)$$

В пределе высоких температур ($\hbar\omega \ll kT$) получим с помощью (5.75) и (5.76)

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= NkT, \\ \langle (\Delta E)^2 \rangle &= N(kT)^2. \end{aligned} \quad (5.77)$$

Интересно отметить поведение относительной флуктуации энергии одного осциллятора. С помощью (5.77) получим

$$\frac{\langle (\Delta E_1)^2 \rangle}{\langle E_1 \rangle^2} = 1, \quad (5.78)$$

где E_1 означает энергию одного осциллятора.

При возрастании средней энергии относительная флуктуация стремится к единице, а не к нулю.

Для N осцилляторов с помощью (5.77) получаем

$$\frac{\langle (\Delta E)^2 \rangle}{\langle E \rangle^2} = \frac{1}{N}. \quad (5.79)$$

При больших N относительные флуктуации малы, что соответствует общему требованию малости относительных флуктуаций в макроскопической системе, находящейся в контакте с термостатом.

12. Покажите, что для системы, описываемой большим каноническим ансамблем, средний квадрат флуктуаций числа частиц определяется соотношением

$$\langle (\Delta N)^2 \rangle = kT \left(\frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu} \right)_T.$$

Решение. В большом каноническом ансамбле выражение для среднего числа частиц $\langle N \rangle$ имеет вид

$$\langle N \rangle = \frac{\sum_{l, N_l} N_l \exp \left(\frac{\mu N_l - E_l}{kT} \right)}{\sum_{l, N_l} \exp \left(\frac{\mu N_l - E_l}{kT} \right)}. \quad (5.80)$$

Дифференцируем равенство (5.80) по химическому потенциалу μ :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu} \right)_T &= \frac{1}{kT} \frac{\sum_{l, N_l} N_l^2 \exp \left(\frac{\mu N_l - E_l}{kT} \right)}{\sum_{l, N_l} \exp \left(\frac{\mu N_l - E_l}{kT} \right)} - \\ &- \frac{1}{kT} \left(\frac{\sum_{l, N_l} N_l \exp \left(\frac{\mu N_l - E_l}{kT} \right)}{\sum_{l, N_l} \exp \left(\frac{\mu N_l - E_l}{kT} \right)} \right)^2 = \\ &= \frac{1}{kT} \left(\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 \right) = \frac{1}{kT} \langle (\Delta N)^2 \rangle. \quad (5.81) \end{aligned}$$

Итак, приведенное в условии задачи равенство доказано.

13. Используя соотношение, приведенное в условии предыдущей задачи, получите выражение для среднего квадрата флуктуаций числа частиц для квантовых ферми- и бозе-газов.

Решение. Для ферми- и бозе-газов выражение для среднего числа частиц, имеющих энергию ε , имеет вид

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right) \pm 1}. \quad (5.82)$$

Вычисляем $\langle (\Delta n)^2 \rangle$ с помощью указанного соотношения:

$$\langle (\Delta n)^2 \rangle = kT \left(\frac{\partial \langle n \rangle}{\partial \mu} \right)_T = \frac{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right)}{\left(\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right) \pm 1\right)^2}. \quad (5.83)$$

Прибавляем и вычитаем единицу в числителе правой части (5.83). В случае ферми-газа, когда в знаменателе стоит «+1», получаем

$$\begin{aligned} \langle (\Delta n)^2 \rangle &= \frac{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right) + 1}{\left(\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right) + 1\right)^2} - \\ &\quad - \frac{1}{\left(\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right) + 1\right)^2} = \langle n \rangle - \langle n \rangle^2. \end{aligned} \quad (5.84)$$

В случае бозе-газа, когда в знаменателе стоит «-1», такая же процедура приводит к следующему результату:

$$\begin{aligned} \langle (\Delta n)^2 \rangle &= \frac{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right) - 1}{\left(\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right) - 1\right)^2} + \\ &\quad + \frac{1}{\left(\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right) - 1\right)^2} = \langle n \rangle + \langle n \rangle^2. \end{aligned} \quad (5.85)$$

14. Проводник соединен тонким проводом с другим очень большим проводником, причем оба проводника и провод сделаны из одного и того же металла. Меньший проводник в присутствии большего имеет емкость C . Найдите средний квадрат флуктуаций числа свободных электронов в этом проводнике.

Решение. Условия задачи позволяют считать, что систему свободных электронов меньшего проводника следует описывать в большом каноническом ансамбле, считая большой проводник

термостатом, с которым происходит обмен энергией и частицами. Поэтому можно воспользоваться соотношением

$$\langle (\Delta n)^2 \rangle = kT \left(\frac{\partial \langle n \rangle}{\partial \mu} \right)_T. \quad (5.86)$$

Химический потенциал μ задается термостатом — большим проводником. При неизменной температуре химический потенциал меньшего проводника может флуктуировать за счет флуктуации числа электронов, что приводит к увеличению электростатической энергии меньшего проводника. При увеличении числа электронов на δn электростатический потенциал увеличивается на $\frac{e\delta n}{C}$. Дополнительная энергия каждого электрона, равная увеличению химического потенциала $\delta\mu$, составляет величину $\frac{e^2\delta n}{C}$. Таким образом,

$$\delta\mu = \frac{e^2\delta n}{C}. \quad (5.87)$$

Отсюда следует равенство

$$\frac{\delta n}{\delta\mu} = \left(\frac{\partial \langle n \rangle}{\partial \mu} \right)_T = \frac{C}{e^2}, \quad (5.88)$$

и для среднего квадрата флуктуации числа свободных электронов в соответствии с (5.86) получаем

$$\langle (\Delta n)^2 \rangle = \frac{kTC}{e^2}. \quad (5.89)$$

Отметим, что соотношение (5.89) можно получить на основании теоремы о равнораспределении энергии по степеням свободы, учитывая дополнительную электростатическую энергию тепловой энергии $\frac{kT}{2}$, приходящуюся на одну степень свободы:

$$\frac{1}{2} \frac{e^2 \langle (\Delta n)^2 \rangle}{C} = \frac{1}{2} kT.$$

15. Получить функцию распределения по флуктуациям энергии в гауссовом приближении, исходя из классической функции распределения в каноническом ансамбле.

Решение. С помощью соотношений (2.11) и (2.3) выражение для классической функции распределения записывается в виде

$$\rho(q, p) = \exp \frac{F - H(q, p)}{kT}. \quad (5.90)$$

Для перехода к функции распределения по энергии необходимо выполнить суммирование по тем элементам объема фазового пространства системы, которые реализуют состояние с заданным значением энергии E . Такое суммирование можно выполнить, домножив (5.90) на $\delta(E - H(q, p))$ и проинтегрировав по фазовому пространству:

$$\rho(E) = \frac{1}{h^{3N} N!} \int d\Gamma \delta(E - H(q, p)) \exp \frac{F - H(q, p)}{kT}.$$

Благодаря наличию δ -функции множитель, содержащий экспоненту, можно вынести за знак интеграла, заменив в нем $H(q, p)$ на E :

$$\rho(E) = \frac{1}{h^{3N} N!} \exp \frac{F - E}{kT} \int d\Gamma \delta(E - H(q, p)).$$

Оставшийся интеграл соответствует статистической сумме системы в микроканоническом ансамбле и равен полному числу состояний с энергией E . Учитывая, что безразмерная энтропия определяется как логарифм числа состояний, перепишем последнее равенство в виде

$$\rho(E) = \exp \frac{F - E}{kT} \exp \frac{S(E)}{k}.$$

Далее, учитывая термодинамическое определение свободной энергии $F = \bar{E} - TS(\bar{E})$, где \bar{E} — среднее значение энергии системы в каноническом ансамбле, и раскладывая $S(E)$ в ряд Тейлора около значения \bar{E} :

$$S(E) = S(\bar{E}) + \frac{\partial S}{\partial \bar{E}} (E - \bar{E}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial \bar{E}^2} (E - \bar{E})^2 + \dots,$$

получаем для $\rho(E)$ в квадратичном по ΔE приближении следующее выражение:

$$\rho(E) \sim \exp \left(- \frac{(\Delta E)^2}{2kC_V T^2} \right). \quad (5.91)$$

При получении (5.91) учтены соотношения

$$\frac{\partial S}{\partial \bar{E}} = \frac{1}{T}, \quad \frac{\partial^2 S}{\partial \bar{E}^2} = - \frac{1}{C_V T^2}.$$

Формула (5.91) представляет собой искомую функцию распределения по флуктуациям энергии в гауссовом приближении. Обратим внимание на то, что эту функцию необходимо заново нормировать, поскольку нормировка исходной функции распре-

деления была нарушена при обрыве тейлоровского разложения для $S(E)$:

$$\rho(E) = A \exp\left(-\frac{(\Delta E)^2}{2kC_V T^2}\right), \quad \int dE d\rho(E) = 1.$$

16. Показать с помощью уравнения Ланжевена (5.11), что $\tau_1 = Bm$ есть время, в течение которого средняя скорость частиц $\langle v(t) \rangle$ уменьшается в e раз по сравнению с начальной скоростью v_0 . Найти $\langle v^2(t) \rangle$ и показать справедливость формулы (5.15) при выполнении условий (5.12) и (5.13).

Решение. Интегрируя уравнение (5.11) при начальном условии $v(0) = v_0$, имеем

$$v(t) = v_0 e^{-\frac{t}{\tau_1}} + e^{-\frac{t}{\tau_1}} \frac{1}{m} \int_0^t e^{\frac{u}{\tau_1}} F(u) du. \quad (5.92)$$

Производим усреднение по ансамблю реализаций случайных сил $F(t)$. Учитывая свойство (5.12), находим

$$\langle v(t) \rangle = v_0 e^{-\frac{t}{\tau_1}} + e^{-\frac{t}{\tau_1}} \frac{1}{m} \int_0^t e^{\frac{u}{\tau_1}} \langle F(u) \rangle du = v_0 e^{-\frac{t}{\tau_1}}. \quad (5.93)$$

Из выражения (5.93) следует приведенное в условии задачи утверждение о величине $\tau_1 = Bm$.

Теперь рассмотрим $\langle v^2(t) \rangle$. Возведем (5.92) в квадрат, тогда, снова учитывая свойство (5.12), получаем

$$\langle v^2(t) \rangle = v_0^2 e^{-\frac{2t}{\tau_1}} + e^{-\frac{2t}{\tau_1}} \frac{1}{m^2} \int_0^t \int_0^t dudv e^{\frac{(u+v)}{\tau_1}} \langle F(u) F(v) \rangle. \quad (5.94)$$

Фигурирующий в (5.94) двойной интеграл легко вычисляется при использовании свойства (5.13) корреляционной функции:

$$C \int_0^t \int_0^t dudv e^{\frac{u+v}{\tau_1}} \delta(u-v) = \frac{C\tau_1}{2} \left(e^{\frac{2t}{\tau_1}} - 1 \right).$$

Теперь для $\langle v^2(t) \rangle$ имеем

$$\langle v^2(t) \rangle = v_0^2 e^{-\frac{2t}{\tau_1}} + \frac{C\tau_1}{2m^2} \left(1 - e^{-\frac{2t}{\tau_1}} \right). \quad (5.95)$$

При достаточно большом времени ($t \rightarrow \infty$) влияние начальных условий сглаживается. При этом $\langle v^2(t) \rangle$ принимает равновесное значение, равное $\frac{kT}{m}$. Поэтому с помощью (5.95) находим

$$\langle v^2(t) \rangle \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \langle v^2 \rangle = \frac{C\tau_1}{2m^2} = \frac{kT}{m}.$$

Отсюда получаем

$$C = \frac{2kTm}{\tau_1} = \frac{2kT}{B}.$$

Подставляя найденное значение C в соотношение (5.95), имеем

$$\langle v^2(t) \rangle = v_0^2 e^{-\frac{2t}{\tau_1}} + \frac{kT}{m} \left(1 - e^{-\frac{2t}{\tau_1}} \right). \quad (5.96)$$

Из этого выражения следует, что равновесное значение среднего квадрата скорости броуновской частицы установится лишь по прошествии времени, значительно превышающего τ_1 : $t \gg \tau_1$.

17. Пользуясь уравнением Ланжевена (5.11), определить характер зависимости координаты броуновской частицы от времени.

Решение. Воспользуемся соотношением (5.92) для скорости броуновской частицы, получаемом при интегрировании уравнения (5.11). Интегрируя выражение (5.92) для $v^2(t)$ по времени при условии $x(0) = 0$, получаем

$$x(t) = \int_0^t v(u) du.$$

Возведя это равенство в квадрат и усреднив по ансамблю реализаций случайных сил $F(t)$, найдем

$$\langle x^2(t) \rangle = \int_0^t \int_0^s du ds \langle v(u) v(s) \rangle. \quad (5.97)$$

Выражение для корреляционной функции скоростей получается с помощью (5.92). Учитывая свойство (5.12), получаем

$$\langle v(u) v(s) \rangle = v_0^2 e^{-\frac{u+s}{\tau_1}} + e^{-\frac{u+s}{\tau_1}} \frac{1}{m^2} \int_0^u \int_0^s d\xi d\zeta e^{\frac{\xi+\zeta}{\tau_1}} \langle F(\xi) F(\zeta) \rangle. \quad (5.98)$$

Учитывая (5.13) и (5.15), переписываем (5.98) в виде

$$\langle v(u)v(s) \rangle = v_0^2 e^{-\frac{u+s}{\tau_1}} + \frac{kT}{m} \left(e^{-\frac{|u-s|}{\tau_1}} - e^{-\frac{(u+s)}{\tau_1}} \right). \quad (5.99)$$

При получении (5.99) мы перешли к новым переменным

$$\xi - \zeta = a, \quad (1/2)(\xi + \zeta) = \beta, \quad (5.100)$$

так что $d\xi d\zeta = d\alpha d\beta$. Подставляем (5.99) в (5.93) и делаем замену переменных типа (5.100) при вычислении интеграла, содержащего $\exp\left(-\frac{|u-s|}{\tau_1}\right)$. Для этого интеграла получаем

$$\begin{aligned} \frac{kT}{m} \int_0^t dudse^{-\frac{|u-s|}{\tau_1}} &= \frac{kT}{m} \int_0^t d\beta \int_{-\beta}^{\beta} d\alpha e^{-\frac{|\alpha|}{\tau_1}} = \\ &= \frac{2kT}{m} \tau_1 t - \frac{2kT}{m} \tau_1^2 \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_1}}\right). \end{aligned}$$

Оставшиеся два интеграла вычисляются элементарно. В результате находим

$$\begin{aligned} \langle x^2(t) \rangle &= v_0^2 \tau_1^2 \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_1}}\right)^2 + \\ &+ \frac{kT}{m} \tau_1^2 \left(-3 + 4e^{-\frac{t}{\tau_1}} - e^{-\frac{2t}{\tau_1}}\right) + 2BkTt. \quad (5.101) \end{aligned}$$

Интересно проанализировать эту формулу в случае больших ($t \gg \tau_1$) и малых ($t < \tau_1$) времен. В первом случае из (5.101) получаем

$$\langle x^2(t) \rangle = 2BkTt,$$

что соответствует стохастическому движению броуновской частицы. Во втором случае система обнаруживает динамическое поведение на очень малых временах. Действительно, разлагая в (5.101) экспоненту в первом слагаемом правой части в ряд Тейлора и удерживая квадратичные по t члены, получаем

$$\langle x^2(t) \rangle = v_0^2 t^2.$$

18. Определить, как изменится спектральная плотность $J(\omega)$ случайного стационарного процесса $x(t)$, если показание прибо-

ра, измеряющего значение $x_{\text{изм}}(t)$, соответствует среднему значению этой величины за время каждого измерения τ :

$$x_{\text{изм}}(t) = \frac{1}{\tau} \int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} x(t') dt'. \quad (5.102)$$

Решение. Подставим в формулу (5.102) спектральное представление (5.16) для величины $x(t)$:

$$x_{\text{изм}}(t) = \frac{1}{\tau} \frac{1}{2\pi} \int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} dt' \int_{-\infty}^{\infty} d\omega x(\omega) e^{-i\omega t'}. \quad (5.103)$$

Меняя в (5.103) порядок интегрирования и вычисляя интеграл по t' , приходим к соотношению

$$x_{\text{изм}}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega x(\omega) \frac{\sin\left(\frac{\omega\tau}{2}\right)}{\left(\frac{\omega\tau}{2}\right)} e^{-i\omega t}. \quad (5.104)$$

С другой стороны, непосредственно применяя к $x_{\text{изм}}(t)$ формулу (5.16), имеем

$$x_{\text{изм}}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega x_{\text{изм}}(\omega) e^{-i\omega t}. \quad (5.105)$$

Сравнивая (5.104) и (5.105), получаем

$$x_{\text{изм}}(t) = x(\omega) \frac{\sin\left(\frac{\omega\tau}{2}\right)}{\left(\frac{\omega\tau}{2}\right)}. \quad (5.106)$$

Так как процесс $x(t)$ и, следовательно, $x_{\text{изм}}(t)$ стационарный, то вследствие (5.19)

$$\langle x_{\text{изм}}(\omega) x_{\text{изм}}(\omega_1) \rangle = 2\pi J_{\text{изм}}(\omega) \delta(\omega + \omega_1).$$

Поэтому $J(\omega)$ и $J_{\text{изм}}(\omega)$ связаны соотношением

$$J_{\text{изм}}(\omega) = J(\omega) \left[\frac{\sin\left(\frac{\omega\tau}{2}\right)}{\left(\frac{\omega\tau}{2}\right)} \right]^2. \quad (5.107)$$

Таким образом, прибор, усредняющий показания по интервалу τ , обрезает частоты $|\omega| > \frac{2\pi}{\tau}$ в спектральной плотности исходного случайного процесса, т. е. обладает определенной «полосой пропускания». Если ширина спектральной плотности $J(\omega)$ исходного процесса $x(t)$ намного превышает $\frac{2\pi}{\tau}$, то в формуле (5.107) можно произвести замену $J(\omega) \rightarrow J(0)$. При этом структура $J_{\text{изм}}(\omega)$ определяется только параметрами прибора. От исходного случайного процесса остается только $J(0)$; вся остальная информация теряется.

Прибор, усредняющий показания по интервалу τ , дает «правильные» значения измеряемой величины и в случае достаточно большого времени корреляции, когда $\gamma \rightarrow 0$: $\frac{1}{\gamma} \gg \tau$.

19. Какую среднюю тепловую скорость броуновской частицы мы обнаружим при визуальном измерении за промежуток времени $\tau = 0,1$ с? Масса частицы $m \sim 10^{-12}$ г, линейный размер $R \sim 10^{-4}$ см, температура среды $T \sim 3 \cdot 10^2$ К, вязкость среды $\eta \sim 10^{-2}$ г/(см·с).

Решение. В соответствии (5.19) и (5.107) для среднего измеряемого квадрата скорости $\langle v_{\text{изм}}^2 \rangle$ имеем

$$\langle v_{\text{изм}}^2 \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega) \left[\frac{\sin\left(\frac{\omega\tau}{2}\right)}{\left(\frac{\omega\tau}{2}\right)} \right]^2. \quad (5.108)$$

Подставляя в (5.108) выражение (5.20) для спектральной плотности $J(\omega)$

$$J(\omega) = J(0) \frac{\gamma^2}{\omega^2 + \gamma^2}$$

и вводя обозначения $u = \omega\tau$, $s = \gamma\tau$, получаем

$$\langle v_{\text{изм}}^2 \rangle = \frac{2}{2\pi} \frac{J(0)}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1 - \cos x}{x^2} \frac{s^2}{x^2 + s^2}. \quad (5.109)$$

Интеграл в (5.109) вычисляется. В результате, учитывая, что

$$\langle v^2(t) \rangle = \frac{kT}{m} = \frac{J(0)\gamma}{2},$$

получаем

$$\frac{\langle v_{\text{изм}}^2 \rangle}{\langle v^2(t) \rangle} = \left(\frac{2}{\gamma\tau} \right) \left(1 - \frac{(1 - e^{-\gamma\tau})}{\gamma\tau} \right). \quad (5.110)$$

Отметим, что при заданных в условии задачи значениях параметров время релаксации составляет $\frac{1}{\gamma} = \tau_1 = \frac{m}{6\pi\eta R} \sim 5 \cdot 10^{-8}$ с. Поэтому $\gamma\tau = \frac{\tau}{\tau_1} \sim 2 \cdot 10^6$, и в формуле (5.108) сразу можно заменить $J(\omega)$ на $J(0) = \frac{kT}{m} \frac{2}{\gamma}$. Опуская в (5.110) второе слагаемое в скобках, находим

$$\frac{\langle v_{\text{изм}}^2 \rangle}{\langle v^2(t) \rangle} = \left(\frac{2}{\gamma\tau} \right) \sim 10^{-6}.$$

Итак, измеряемое значение тепловой скорости броуновской частицы оказывается в 10^3 раз меньше истинного равновесного значения.

20. Рассмотреть тепловые флуктуации в замкнутой цепи, состоящей из сопротивления R и индуктивности L , помещенной в термостат с температурой T . Определить спектральную плотность теплового шума ЭДС E и тока I в цепи. Найти выражение для корреляционной функции $\langle I(t + \tau)I(t) \rangle$.

Решение. Закон Ома для рассмотренной цепи можно записать в виде

$$LI + IR = E. \quad (5.111)$$

Это уравнение имеет такой же вид, как и уравнение для одномерного броуновского движения (5.11). Поэтому, предполагая, что флуктуации ЭДС E имеют характер белого шума, можно с помощью соотношений (5.15) непосредственно написать

$$\langle E(t + \tau)E(t) \rangle = 2kTR\delta(\tau). \quad (5.112)$$

Согласно определению (5.19) имеем

$$(E^2)_{\omega} = 2kTR \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \delta(t) = 2kTR, \quad (5.113)$$

где $(E^2)_{\omega}$ определяется соотношением

$$\langle E(\omega)E(\omega_1) \rangle = 2\pi(E^2)_{\omega} \delta(\omega + \omega_1). \quad (5.114)$$

Уравнение (5.111) в представлении Фурье может быть записано в виде

$$(-i\omega L + R)I(\omega) = E(\omega).$$

Теперь с помощью формулы (5.114) можно написать

$$(I^2)_\omega = \frac{(E^2)_\omega}{R^2 + L^2\omega^2}.$$

Используя (5.113), перепишем это соотношение следующим образом:

$$(I^2)_\omega = \frac{2kTR}{R^2 + L^2\omega^2}. \quad (5.115)$$

Для вычисления корреляционной функции $\langle I(t + \tau)I(t) \rangle$ воспользуемся формулой (4.19) и соотношением (5.115). Имеем

$$\langle I(t + \tau)I(t) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{2kTR}{R^2 + L^2\omega^2} e^{-i\omega\tau}.$$

Вычисляя интеграл по теории вычетов, находим

$$\langle I(t + \tau)I(t) \rangle = \frac{kT}{L} \exp\left(-\frac{R}{L}\tau\right).$$

Задачи для самостоятельного решения

21. Для системы с фиксированным объемом вычислить флуктуации термодинамических величин $\langle(\Delta S)^2\rangle$, $\langle(\Delta\mu)^2\rangle$, $\langle(\Delta T)^2\rangle$, $\langle(\Delta N)^2\rangle$, $\langle\Delta N\Delta T\rangle$, $\langle\Delta T\Delta\mu\rangle$, $\langle\Delta N\Delta\mu\rangle$, $\langle\Delta\mu\Delta S\rangle$, $\langle\Delta S\Delta N\rangle$ и $\langle\Delta S\Delta T\rangle$, используя функцию распределения (5.7).

22. Вычислить флуктуацию энергии $\langle(\Delta E)^2\rangle$, используя функцию распределения (5.7) при фиксированном объеме.

23. Вычислить флуктуацию энергии $\langle(\Delta E)^2\rangle$ в большом каноническом ансамбле и сравнить ответ с результатом, полученным в задаче 15.

ДИНАМИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ТЕОРИИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ЯВЛЕНИЙ

§ 6.1. Статистическое описание неравновесных систем

Описание статистических свойств неравновесных макроскопических систем производится с помощью зависящей от времени функции распределения (статистического оператора), определяемого для классических систем следующим образом:

$$\rho(x, t) = \int dx(0) \rho(x(0), 0) \delta(x - x(t)), \quad (6.1)$$

где $x = \{x_1, \dots, x_n\}$ — полный набор динамических переменных рассматриваемой системы; $x(t) = \{x_1(t), \dots, x_n(t)\}$ — решения соответствующих динамических уравнений:

$$\dot{x}_i = V_i(x, t) \quad (i = 1, \dots, n). \quad (6.2)$$

В системе уравнений (6.2) V_i — заданные функции набора x и времени t ; $\rho(x(0), 0)$ — статистическая функция распределения системы в начальный момент времени $t = 0$; $\delta(x - x(t))$ — динамическая функция распределения системы (микроскопическая фазовая плотность). Отметим, что динамика системы, задаваемая уравнениями (6.2), может и не иметь гамильтоновой формы.

§ 6.2. Уравнения Лиувилля и Неймана

Основу динамического подхода к описанию статистических свойств гамильтоновых систем многих частиц составляют уравнения Лиувилля и Неймана для классических и квантовых систем соответственно. Уравнение Лиувилля, которому удовлетворяет n -частичная функция распределения $\rho(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n, t)$, имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + [H, \rho] = 0, \quad (6.3)$$

где H — функция Гамильтона, а $[H, \rho]$ — классические скобки Пуассона:

$$[H, \rho] = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{r}_i} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{p}_i} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} \right). \quad (6.4)$$

Уравнение (6.1) удобно записывать в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + iL\rho = 0, \quad (6.5)$$

где $L = -i[H]$ — самосопряженный оператор Лиувилля: $L = L^\dagger$.

Основу описания свойств квантовых систем составляет уравнение Неймана

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [H, \rho] = 0, \quad (6.6)$$

где ρ — оператор (матрица) плотности системы n частиц, H — оператор Гамильтона, а $[H, \rho] = H\rho - \rho H$ коммутатор операторов H и ρ .

Уравнения Лиувилля и Неймана соответствуют полному статистическому ансамблю, они обратимы во времени и обеспечивают стационарность энтропии системы $S = -\text{Sp}(\rho \ln \rho)$:

$$\frac{dS}{dt} = 0. \quad (6.7)$$

Переход к сокращенному описанию приводит, вообще говоря, к появлению макроскопической необратимости во времени. Оно осуществляется редуцированной функцией распределения ρ_1 (оператором плотности), которая соответствует неполному ансамблю. Основная проблема неравновесной статистической механики — получение и решение управляющих уравнений, т. е. замкнутых уравнений для $\rho_1(t)$. Уравнения для редуцированных функций распределения часто называются кинетическими уравнениями.

§ 6.3. Приближение самосогласованного поля

Простейшее приближение для n -частичной функции распределения — это мультипликативное приближение

$$\rho(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n, t) = f(\mathbf{r}_1 \mathbf{p}_1 t) f(\mathbf{r}_2 \mathbf{p}_2 t) \dots f(\mathbf{r}_n \mathbf{p}_n t), \quad (6.8)$$

которое приводит к приближению самосогласованного поля, когда каждая частица системы движется в поле, создаваемом частицами системы и приложенным внешним полем. Уравнение,

которому удовлетворяет одночастичная функция распределения $f_a(\mathbf{r}\mathbf{p}t)$ частиц сорта a , называется уравнением Власова:

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \sum_b \int d\mathbf{r}_b d\mathbf{p}_b U(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b) f_b(\mathbf{r}_b \mathbf{p}_b t) = 0. \quad (6.9)$$

Здесь U — энергия взаимодействия частиц сорта a и b .

Уравнение Власова обратимо во времени. Иногда в правой части уравнения (6.9) оставляют «след» интеграла столкновений в приближении времени релаксации и записывают ее в виде $-\varepsilon(f_a - f_{a0})$, где $\varepsilon \rightarrow +0$, а f_{a0} — равновесная функция распределения.

В случае системы заряженных частиц уравнение Власова записывается в виде

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{r}} + e_a \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v}\mathbf{B}] \right) \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{p}} = 0. \quad (6.10)$$

Здесь $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ — кинетический импульс, а \mathbf{E} и \mathbf{B} определяются из системы уравнений Максвелла

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{E} &= 4\pi\rho_{\text{эл}}, & \operatorname{div} \mathbf{B} &= 0, \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \end{aligned} \quad (6.11)$$

Плотность заряда $\rho_{\text{эл}}$ и плотность тока \mathbf{j} выражаются через одночастичные функции распределения:

$$\begin{aligned} \rho_{\text{эл}}(\mathbf{r}, t) &= \sum_a e_a \int d\mathbf{p} f_a(\mathbf{r}\mathbf{p}t), \\ \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= \sum_a e_a \int d\mathbf{p} \mathbf{p} f_a(\mathbf{r}\mathbf{p}t), \end{aligned} \quad (6.12)$$

Приближение самосогласованного поля особенно удобно для определения спектра коллективных возбуждений в системе. Он находится из дисперсионного уравнения, получаемого с помощью уравнения Власова и системы уравнений Максвелла после перехода к фурье-представлению ($\sim \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)$) и имеющего вид

$$\Delta(k, \Omega) = 0. \quad (6.13)$$

Здесь $\Omega = \omega + i\gamma$, причём $\frac{\gamma}{\omega} \ll 1$. Закон дисперсии колебаний $\omega(\mathbf{k})$ находится из уравнения

$$\operatorname{Re} \Delta(\mathbf{k}, \omega) = 0, \quad (6.14)$$

а величина γ , соответствующая затуханию колебаний при $\gamma < 0$ и нарастанию при $\gamma > 0$, определяется соотношением

$$\gamma = - \left. \frac{\frac{\text{Im}\Delta(\mathbf{k}, \omega)}{\partial} \frac{\text{Re}\Delta(\mathbf{k}, \omega)}{\partial\omega}}{\omega=\omega(\mathbf{k})} \right| . \quad (6.15)$$

Определяемое из уравнения Власова затухание γ называется затуханием Ландау. Оно соответствует взаимодействию волна-частица типа взаимодействия Вавилова—Черенкова и не приводит к необратимой диссипации энергии волны.

Задачи

1. Вывести уравнение эволюции во времени статистической функции распределения $\rho(x, t)$, определенной соотношением (6.1)

$$\rho(x, t) = \int dx(0) \rho(x(0), 0) \delta(x - x(t)), \quad (6.16)$$

не предполагая гамильтонового характера динамики системы. Показать, что функция $\rho(x, t)$ удовлетворяет условию нормировки в любой момент времени t , если нормирована функция $\rho(x(0), 0)$ начального распределения.

Решение. Выражение (6.1) соответствует усреднению динамической флуктуации распределения

$$\delta(x - x(t)) = \prod_{k=1}^n \delta(x_k - x_k(t)),$$

по начальному распределению $\rho(x(0), 0)$ соответствующему отсутствию точной информации о начальных условиях для динамических уравнений. Формулу (6.16) можно рассматривать как решение задачи Коши для уравнения эволюции с произвольным начальным распределением $\rho(x(0), 0)$ в начальный момент $t = 0$. Динамическая функция распределения $\delta(x - x(t))$ в этом решении играет роль функции Грина — решения с сингулярным начальным условием. Знание этой функции, разумеется, означает возможность решения динамической задачи (6.2) $x(t) = X(x(0), t)$, причем при произвольных начальных условиях $x(0)$.

Для нахождения уравнения, которому удовлетворяет функция $\rho(x, t)$, продифференцируем (6.16) по времени при фиксиро-

ванных значениях динамических переменных x . Учитывая (6.2), имеем

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \int dx(0) \rho(x(0), 0) \sum_i \frac{\partial \delta(x - x(t))}{\partial x_i(t)} V_i(x(t), t). \quad (6.17)$$

Заменяем производную $\frac{\partial}{\partial x_i(t)} = -\frac{\partial}{\partial x_i}$ и вынесем производную $\frac{\partial}{\partial x_i}$ из-под знака интеграла, что законно, так как под знаком интеграла имеется $\delta(x - x(t))$. По этой же причине в аргументах функций V_i можно заменить решения динамических уравнений $x(t)$ на соответствующие динамические переменные x . Получим

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \int dx(0) \rho(x(0), 0) \delta(x - x(t)) V_i(x, t). \quad (6.18)$$

Сравнивая выражения (6.18) с формулой (6.16), получаем уравнение эволюции для функции распределения $\rho(x, t)$:

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} [\rho(x, t) V_i(x, t)] = 0. \quad (6.19)$$

Отметим, что в случае гамильтоновой системы, когда динамические переменные $x = (p, q)$ удовлетворяют системе канонических уравнений

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad (6.20)$$

уравнение (6.19) переходит в уравнение Лиувилля. Действительно, заменяя в (6.19) динамические переменные x на канонически сопряженные p и q , выполняя дифференцирование по q_i и p_i и используя уравнения Гамильтона (6.20), приходим к уравнению Лиувилля (6.3), поскольку в силу (6.20) справедливо:

$$\begin{aligned} \rho(x, t) \sum_i \frac{\partial V_i(x, t)}{\partial x_i} &= \rho(p, q, t) \sum_i \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right) = \\ &= \rho(p, q, t) \sum_i \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i} \right) = 0. \end{aligned}$$

Функция распределения $\rho(x, t)$, даваемая формулой (6.16), удовлетворяет условию нормировки, если нормирована функция $\rho(x(0), 0)$, описывающая начальное распределение. Действительно,

$$\begin{aligned} \int dx \rho(x, t) &= \int dx dx(0) \rho(x(0), 0) \delta(x - x(t)) = \\ &= \int dx(0) \rho(x(0), 0) = 1. \end{aligned}$$

2. Покажите, что средние значения $\langle F(t) \rangle$, вычисляемые с функцией распределения (6.1)

$$\langle F(t) \rangle = \text{Sp}(\rho(t)F(t)), \quad (6.21)$$

обладает свойством:

$$\frac{d}{dt} \langle F(t) \rangle = \left\langle \frac{dF(t)}{dt} \right\rangle. \quad (6.22)$$

Решение. Запишем среднее значение $\langle F(t) \rangle$ в случае классической системы следующим образом:

$$\langle F(t) \rangle = \int dx \rho(x, t) F(x, t), \quad (6.23)$$

где x — совокупность динамических переменных системы. Подставляя в (6.23) выражение (6.1), приводим среднее значение $\langle F(t) \rangle$ к виду

$$\begin{aligned} \langle F(t) \rangle &= \int dx dx(0) \rho(x(0), 0) \delta(x - x(t)) F(x, t) = \\ &= \int dx(0) \rho(x(0), 0) F(x(t), t). \end{aligned} \quad (6.24)$$

Сравнивая (6.23) и (6.24), видим, что находить среднее значение $\langle F(t) \rangle$ можно двумя способами: либо с помощью функции $\rho(x, t)$, заданной в момент времени t , либо с помощью начального распределения $\rho(x(0), 0)$. В первом случае $F(x, t)$ задается как функция динамических переменных x , а во втором — как функция решений динамических уравнений $x(t)$.

Пользуясь соотношением (6.24), составим производную $\frac{d\langle F(t) \rangle}{dt}$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle F(t) \rangle &= \frac{d}{dt} \int dx(0) \rho(x(0), 0) F(x(t), t) = \\ &= \int dx(0) \rho(x(0), 0) \frac{d}{dt} F(x(t), t), \end{aligned} \quad (6.25)$$

поскольку операции дифференцирования по времени и интегрирования по $x(0)$ коммутативны.

Теперь с помощью (6.24) найдем среднее значение $\frac{dF(t)}{dt}$; имеем

$$\left\langle \frac{dF(t)}{dt} \right\rangle = \int dx(0) \rho(x(0), 0) \frac{dF(x(t), t)}{dt}, \quad (6.26)$$

поскольку взятие полной производной по времени от $F(t)$ подразумевает подстановку в выражение для F решений динамических уравнений $x(t)$.

Видно, что выражения (6.25) и (6.26) тождественны.

3. Покажите, что соотношение (6.22) не противоречит равенству

$$\frac{d}{dt} \langle F(t) \rangle = \int dx \left(\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} F(x, t) + \rho(x, t) \frac{\partial F(x, t)}{\partial t} \right), \quad (6.27)$$

получаемому с помощью выражения (6.23).

Решение. Отметим, прежде всего, что x в формуле (6.27) — это набор динамических переменных системы. Используя уравнение (6.19), переписываем первое слагаемое в правой части (6.27) в виде

$$- \sum_i \int dx \frac{\partial}{\partial x_i} \{ \rho(x, t) V_i(x, t) \} F(x, t). \quad (6.28)$$

Интегрируя (6.28) по частям и учитывая, что $\rho(x, t)$ обращается в нуль на границах фазового объема рассматриваемой системы, получаем

$$\sum_i \int dx \rho(x, t) V_i(x, t) \frac{\partial F(x, t)}{\partial x_i}, \quad (6.29)$$

так что все выражение (6.27) принимает вид

$$\frac{d}{dt} \langle F(t) \rangle = \int dx \rho(x, t) \left\{ \frac{\partial F(x, t)}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial F(x, t)}{\partial x_i} V_i(x, t) \right\}. \quad (6.30)$$

Подставляя в правую часть (6.30) выражение (6.1) для $\rho(x, t)$ и выполняя интегрирование по x , получаем

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle F(t) \rangle &= \int dx dx(0) \rho(x(0), 0) \delta(x - x(t)) \times \\ &\times \left\{ \frac{\partial F(x, t)}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial F(x, t)}{\partial x_i} V_i(x, t) \right\} = \end{aligned}$$

$$= \int dx(0) \rho(x(0), 0) \left\{ \frac{\partial F(x(t), t)}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial F(x(t), t)}{\partial x_i(t)} V_i(x(t), t) \right\} = \int dx(0) \rho(x(0), 0) \frac{dF(x(t), t)}{dt}, \quad (6.31)$$

что совпадает с выражением (6.26).

4. Покажите, что средние значения $\langle F(t) \rangle = \text{Sp}(\rho(t)F(t))$, получаемые со статистическим оператором $\rho(t)$, удовлетворяющим уравнению Неймана, обладают свойством

$$\frac{d}{dt} \langle F(t) \rangle = \left\langle \frac{d\tilde{F}(t)}{dt} \right\rangle_0, \quad (6.32)$$

где символом F и \tilde{F} обозначен один и тот же оператор в представлении Шредингера и Гейзенберга соответственно, а индекс «0» означает, что усреднение проводится с оператором $\rho(0)$, взятым в начальный момент времени:

$$\left\langle \frac{d\tilde{F}(t)}{dt} \right\rangle_0 = \text{Sp} \left(\rho(0) \frac{d\tilde{F}(t)}{dt} \right).$$

Решение. Записываем уравнение Неймана

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [H, \rho(t)] = 0 \quad (6.33)$$

и ищем его решение в виде

$$\rho(t) = S(t)\rho(0)S^+(t). \quad (6.34)$$

Подставляя (6.34) в уравнение (6.33), получаем, что оператор $S(t)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial S(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} HS(t) \quad (6.35)$$

с начальным условием $S(0) = 1$. Поскольку оператор энергии H эрмитов, то из (6.35) следует уравнение для эрмитово сопряженного оператора S^+ :

$$\frac{\partial S^+(t)}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} S^+(t) H. \quad (6.36)$$

Вычислим производные по времени от произведений SS^+ и S^+S . С помощью уравнений (6.35) и (6.36) находим

$$\frac{\partial}{\partial t} S^+S = 0, \quad (6.37)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} S S^+ = -\frac{1}{i\hbar} [S S^+, H]. \quad (6.38)$$

При начальном условии $S(0) = 1$ решения уравнений (6.37) и (6.38) имеют следующий вид:

$$S^+(t)S(t) = 1, \quad S(t)S^+(t) = 1. \quad (6.39)$$

Из равенств (6.39) следует, что оператор $S(t)$ унитарный:

$$S^+(t) = S^{-1}(t). \quad (6.40)$$

При этом статистический оператор $\rho(t)$ остается эрмитовым и сохраняет нормировку: $\text{Sp } \rho(t) = 1$.

Подставляя выражение (6.34) в формулу для среднего значения

$$\langle F(t) \rangle = \text{Sp}(\rho(t)F(t)) \quad (6.41)$$

и используя возможность циклической перестановки операторов под знаком шпура, имеем

$$\langle F(t) \rangle = \text{Sp} \left(\rho(0) \tilde{F}(t) \right), \quad (6.42)$$

где

$$\tilde{F}(t) = S^+(t) F(t) S(t). \quad (6.43)$$

Соотношение (6.43) соответствует переходу от шредингеровского представления к гейзенберговскому; поэтому соотношения (6.41) и (6.42) можно объединить следующим образом:

$$\langle F(t) \rangle = \left\langle \tilde{F}(t) \right\rangle_0. \quad (6.44)$$

Дифференцируем выражение (6.44) по времени. Учитывая коммутативность операции дифференцирования по времени и взятие шпура с оператором $\rho(0)$, имеем

$$\frac{d}{dt} \langle F(t) \rangle = \left\langle \frac{d\tilde{F}(t)}{dt} \right\rangle_0. \quad (6.45)$$

Таким образом, используя формулу (6.45) при нахождении производных по времени от средних значений операторов, следует помнить о необходимости перехода к гейзенберговскому представлению и использования статистического оператора, заданного в начальный момент времени.

5. Используя результаты предыдущей задачи, докажите справедливость соотношения

$$\langle F(t) \rangle = \langle F(t) \rangle_0 + \frac{it}{\hbar} \langle [H, F(t)] \rangle_0 + \frac{i^2 t^2}{2! \hbar^2} \langle [H, [H, F(t)]] \rangle_0 + \dots, \quad (6.46)$$

в случае, когда гамильтониан системы не зависит от времени.

Решение. Доказательство основано на использовании квантово-механического тождества:

$$e^A B e^{-A} = B + \frac{1}{1!} [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \dots, \quad (6.47)$$

которое доказывается путем дифференцирования по параметру λ оператора

$$C(\lambda) = e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} \quad (6.48)$$

и использования разложения $C(\lambda)$ в ряд Тейлора. При независимом от времени гамильтониане H решением уравнения (6.35) будет оператор

$$S(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} t H}. \quad (6.49)$$

Используя соотношение (6.43) и (6.49), можно с учетом формулы (6.47) представить равенство (6.44) в виде разложения (6.46). Таким образом, возможно представление усреднения оператора $F(t)$ со статистическим оператором $\rho(t)$, взятым в тот же момент времени, в виде разложения по степеням времени t усреднений со статистическим оператором $\rho(0)$, взятым в начальный момент времени, причем усредняемые объекты представляют собой кратные коммутаторы $F(t)$ с гамильтонианом системы.

6. Среди полного набора динамических переменных системы можно выделить группу переменных X_1, \dots, X_n и Y_1, \dots, Y_m , характерные временные масштабы изменения которых резко различаются («медленные» и «быстрые» переменные). Исследуйте возможность перехода к сокращенному описанию такой системы и получению управляющих уравнений, описывающих эволюцию во времени медленных переменных.

Решение. Для полного набора динамических переменных системы существует замкнутая система уравнений (например, уравнения гамильтонова типа)

$$\frac{dX}{dt} = f(X, Y, t), \quad \frac{dY}{dt} = g(X, Y, t), \quad (6.50)$$

где X и Y — векторы с компонентами X_1, \dots, X_n и Y_1, \dots, Y_m соответственно, f и g — векторные функции с компонентами

f_1, \dots, f_n и g_1, \dots, g_m . Медленность изменения величин X по сравнению с изменением величин Y позволяет решать вторую группу уравнений (6.50) для Y , рассматривая в них X как фиксированные параметры. Такое положение оправданно, например, в случаях, когда время изменения величин Y оказывается существенно меньше времени изменения величин X , которые в этом случае являются квазиинтегралами движения по отношению к переменным Y . При этом получаем

$$Y = G(X, t). \quad (6.51)$$

Подставляя выражение (6.51) в первую группу уравнений (6.50), получаем замкнутую систему уравнений для величин X :

$$\frac{dX}{dt} = f(X, G(X, t), t) = \varphi(X, t). \quad (6.52)$$

Система уравнений (6.52) — это и есть управляющие уравнения, определяющие медленную эволюцию системы. Фактическое использование выражения (6.51) требует знания начальных условий для величин Y , которые, разумеется, взять неоткуда. Поэтому для величин Y берутся квазиравновесные значения, соответствующие решению уравнения (6.51) при $t \rightarrow \infty$: величины Y успевают релаксировать и прийти в квазиравновесное состояние, не зависящее от начальных условий, при фиксированных значениях величин X . Для величин X это означает переход к новому огрубленному масштабу времени. Поэтому фактически систему (6.52) следует понимать в смысле

$$\frac{\Delta X}{\Delta t} = \varphi(X, t), \quad (6.53)$$

где Δt макроскопически мало, но все-таки много больше характерного времени «забывания» исходных значений Y . Величина Δt и играет в рассматриваемом случае роль времени корреляции t_c в иерархии временных масштабов Боголюбова. Для применимости управляющих уравнений (6.52) необходимо, чтобы время релаксации τ величин X было много больше времени корреляции t_c .

Таким образом, проблема получения управляющих уравнений в рамках динамического подхода заключается в нахождении квазиинтегралов движения в рассматриваемой системе, которые и играют роль медленно изменяющихся во времени величин X .

7. Получите уравнение для редуцированной функции распределения $\rho_1(t) = \mathcal{P}\rho(t)$, где \mathcal{P} — некоторый оператор проецирования, с помощью точного уравнения Лиувилля для пол-

ной функции распределения ρ и обсудите возможность перехода к управляющему уравнению, замкнутому относительно $\rho_1(t)$.

Решение. Введем функцию $\rho_2(t) = (1 - \mathcal{P})\rho(t)$ и получим уравнения для ρ_1 и ρ_2 , действуя операторами \mathcal{P} и $(1 - \mathcal{P})$ на уравнение Лиувилля

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + iL\rho = 0. \quad (6.54)$$

Имеем

$$\begin{aligned} i\frac{\partial \rho_1}{\partial t} &= \mathcal{P}L(\rho_1 + \rho_2), \\ i\frac{\partial \rho_2}{\partial t} &= (1 - \mathcal{P})L(\rho_1 + \rho_2). \end{aligned} \quad (6.55)$$

Запишем второе уравнение из (6.54) в виде

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} = M\rho_2 + \varphi(t), \quad (6.56)$$

где использованы обозначения

$$M = (1 - \mathcal{P})L, \quad \varphi(t) = (1 - \mathcal{P})L\rho_1(t).$$

Ищем решение уравнения (6.55) в виде

$$\rho_2(t) = e^{-itM}\psi(t). \quad (6.57)$$

Подставляя это выражение в уравнение (6.56), получаем

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -ie^{itM}\varphi(t), \quad \text{где } \psi(0) = \rho_2(0).$$

Интегрируя по времени в пределах от нуля до t , находим

$$\psi(t) = \psi(0) - i \int_0^t d\tau e^{i\tau M} \varphi(\tau). \quad (6.58)$$

Подставляя (6.58) в (6.57) и совершая замену переменной $s = t - \tau$, приходим к следующему выражению для $\rho_2(t)$:

$$\rho_2(t) = e^{-itM}\rho_2(0) - i \int_0^t ds e^{-isM} \varphi(t-s),$$

или после подстановки выражений для M и φ

$$\begin{aligned} \rho_2(t) &= \exp[-it(1 - \mathcal{P})L]\rho_2(0) - \\ &\quad - i \int_0^t ds \exp[-is(1 - \mathcal{P})L](1 - \mathcal{P})L\rho_1(t-s). \end{aligned}$$

Подставляем найденное значение $\rho_2(t)$ в первое уравнение из (6.55) для $\rho_1(t)$. Имеем

$$i \frac{\partial \rho_1(t)}{\partial t} = \mathcal{P}L\rho_1(t) + \mathcal{P}L \exp[-it(1-\mathcal{P})L] \rho_2(0) - \\ - i \int_0^t ds \mathcal{P}L \exp[-is(1-\mathcal{P})L] (1-\mathcal{P})L\rho_1(t-s). \quad (6.59)$$

Уравнение (6.59) — это точное уравнение, ибо при его выводе на основе использования уравнения Лиувилля (6.54) не делалось никаких приближений. В отличие от уравнения (6.54) уравнение (6.59) для $\rho_1(t)$ имеет нелокальный во времени характер, т. е. обладает памятью. Стоящее под знаком интеграла перед функцией $\rho_1(t-s)$ ядро называется функцией памяти.

Для получения управляющего уравнения в уравнении (6.59) необходимо исключить (или задать в явном виде) $\rho_2(0)$ и обратить в нуль функцию памяти за то время s , за которое функция $\rho_1(t-s)$ не меняется существенно. Физической основой замыкания уравнения эволюции на уровне сокращенного описания является иерархия временных масштабов Боголюбова, позволяющая ввести для $\rho_1(t)$ новую огрубленную временную шкалу. В этой шкале указанные выше условия выполняются в каждый момент времени. Другими словами, система успевает «забыть» о начальном распределении быстро меняющихся параметров за время, малое по сравнению с характерным временем изменения функции $\rho_1(t)$. Из приведенного рассуждения видно, что основная трудность в получении управляющих уравнений на основе динамического подхода — выбор проектирующего оператора \mathcal{P} .

8. В приближении самосогласованного поля функция Гамильтона для системы заряженных частиц записывается в виде

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \left(\mathbf{p}_i - \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i t) \right)^2 + \sum_{i=1}^N e_i \varphi(\mathbf{r}_i t), \quad (6.60)$$

где (\mathbf{A}, ϕ) — четырехмерный потенциал самосогласованного электромагнитного поля, с помощью которого определяются напряженность \mathbf{E} электрического поля и индукция \mathbf{B} магнитного поля:

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \operatorname{grad} \varphi, \quad \mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}, \quad (6.61)$$

\mathbf{p}_i — канонический импульс i -й частицы системы с зарядом e_i и массой m_i . В представлении канонического импульса уравне-

ние Лиувилля имеет обычный вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{r}_i} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{p}_i} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} \right) = 0. \quad (6.62)$$

Запишите уравнение Лиувилля в представлении кинетического импульса

$$\mathbf{P}_i = \mathbf{p}_i - \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i t), \quad (6.63)$$

вводя в него в явном виде векторы \mathbf{E} и \mathbf{B} .

Решение. Вычислим входящие в (6.62) производные от функции Гамильтона (6.60) по \mathbf{r} и \mathbf{p} , выразив результат через определяемый формулой (6.63) кинетический импульс \mathbf{P} . Имеем

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} = \frac{1}{m_i} \left(\mathbf{p}_i - \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i t) \right) = \frac{1}{m_i} \mathbf{P}_i(\mathbf{r}_i t). \quad (6.64)$$

Для вычисления производной по \mathbf{r}_i воспользуемся формулой векторного анализа

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} (\mathbf{a} \mathbf{b}) = \left(\mathbf{a} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \mathbf{b} + \left(\mathbf{b} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \mathbf{a} + [\mathbf{a}, \text{rot } \mathbf{b}] + [\mathbf{b}, \text{rot } \mathbf{a}].$$

Получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} = & -\frac{1}{m_i} \left(\left(\mathbf{p}_i - \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i t) \right) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \right) \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i t) - \\ & - \frac{1}{m_i} \left[\left(\mathbf{p}_i - \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i t) \right), \text{rot } \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i t) \right] + e_i \varphi(\mathbf{r}_i t). \end{aligned}$$

С учетом второй формулы из (6.61) это выражение можно переписать в виде

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} = -\frac{e_i}{m_i c} \left(\mathbf{P}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \right) \mathbf{A}(\mathbf{r}_i t) - \frac{e_i}{m_i c} [\mathbf{P}_i, \mathbf{B}(\mathbf{r}_i t)] + e_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \varphi(\mathbf{r}_i t). \quad (6.65)$$

Теперь нужно преобразовать производные от функции распределения ρ по \mathbf{r}_i и t в (6.62), вычисляемые при фиксированных \mathbf{p}_i , в производные, вычисляемые при фиксированных \mathbf{P}_i . Для этого запишем ρ в виде

$$\rho(\mathbf{p}_i, \mathbf{r}_i, t) = \rho \left(\mathbf{P}_i + \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i t), \mathbf{r}_i, t \right).$$

Прежде всего видно, что

$$\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{p}_i} = \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{P}_i}.$$

Далее,

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{\mathbf{p}_i, \mathbf{r}_i} = \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{\mathbf{P}_i, \mathbf{r}_i} - \sum_{i=1}^N \frac{e_i}{c} \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{P}_i} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i t). \quad (6.66)$$

При этом, дифференцируя ρ по t при фиксированных \mathbf{P}_i , мы также учитываем зависимость от времени и величины $\mathbf{A}(\mathbf{r}_i t)$, которая отсутствует в левой части равенства при вычислении производной по t при фиксированных \mathbf{p}_i . Аналогично

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{r}_i}\right)_{t, \mathbf{P}_k} = \left(\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{r}_i}\right)_{t, \mathbf{P}_k} - \frac{e_i}{c} \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{\partial \rho}{\partial P_{i\alpha}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} A_\alpha(\mathbf{r}_i t). \quad (6.67)$$

С помощью приведенных равенств (6.64)–(6.67) переписываем уравнение (6.62) следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} - \sum_{i=1}^N \frac{e_i}{c} \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{P}_i} \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}_i t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\mathbf{P}_i}{m_i} \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{r}_i}\right) - \\ - \sum_{i=1}^N \frac{e_i}{c} \left(\frac{\mathbf{P}_i}{m_i} \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{\partial \rho}{\partial P_{i\alpha}} \frac{\partial A_\alpha}{\partial \mathbf{r}_i}\right) + \sum_{i=1}^N \frac{e_i}{m_i c} \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{P}_i} \left(\mathbf{P}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i}\right) \mathbf{A}(\mathbf{r}_i t) + \\ + \sum_{i=1}^N \frac{e_i}{m_i c} \left(\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{P}_i} [\mathbf{P}_i, \mathbf{B}(\mathbf{r}_i t)]\right) - \sum_{i=1}^N e_i \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{P}_i} \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}_i} = 0. \end{aligned}$$

Здесь все производные по t и \mathbf{r}_i вычисляются при фиксированных \mathbf{P}_i . Второе и последнее слагаемые в правой части объединяются и выделяют напряженность электрического поля в соответствии с первой формулой из (6.61). Четвертое и пятое слагаемые, как нетрудно видеть, различаются только знаком.

Поэтому окончательно имеем

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{P}_i}{m_i} \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^N e_i \left\{ \mathbf{E}(\mathbf{r}_i t) + \left[\frac{\mathbf{P}_i(\mathbf{r}_i t)}{cm_i}, \mathbf{B}(\mathbf{r}_i t) \right] \right\} \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{P}_i} = 0. \quad (6.68)$$

Это уравнение Лиувилля для системы заряженных частиц, рассматриваемой в приближении самосогласованного поля и записанное в представлении кинетического импульса. Выбрав ρ в мультипликативном виде (6.5), с помощью (6.68) легко прийти к уравнению Власова (6.7).

9. Определите электрическое поле покоящегося точечного заряда q в однородной равновесной плазме в приближении самоогласованного поля.

Решение. Потенциал поля неподвижного заряда в равновесной плазме дает система уравнений, состоящая из кинетического уравнения в приближении самоогласованного поля, в котором обращен в нуль член с производной по времени

$$\mathbf{v}_a \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{r}} - q_a \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{p}} = 0, \quad (6.69)$$

и уравнения Пуассона, которому удовлетворяет скалярный потенциал ϕ самоогласованного поля:

$$\Delta \varphi(\mathbf{r}) = -4\pi \sum_a q_a \int d\mathbf{p} f_a(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - 4\pi q \delta(\mathbf{r}). \quad (6.70)$$

В этих уравнениях f_a — функция распределения частиц сорта a , q_a — заряд частицы сорта a . Равновесная плазма в целом электронейтральна в отсутствие внешнего заряда, который помещается в точку с $\mathbf{r} = 0$.

Решением уравнения (6.69), как можно убедиться непосредственной подстановкой, является выражение

$$f_a(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = F_a \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_a} + q_a \varphi(\mathbf{r}) \right), \quad (6.71)$$

где F_a — произвольная функция указанного аргумента. Учитывая, что при $r \rightarrow \infty$ потенциал электрического поля равен нулю, а равновесная функция распределения — это максвелловская функция, зависящая только от импульса, найдем

$$f_a(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{n_a}{(2\pi m_a \kappa T_a)^{\frac{3}{2}}} \exp \left[-\frac{1}{\kappa T_a} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_a} + q_a \varphi(\mathbf{r}) \right) \right], \quad (6.72)$$

где n_a — концентрация, а T_a — температура сорта a . Поскольку плазма в отсутствие внешнего заряда электронейтральна, то

$$\sum_a q_a n_a = 0. \quad (6.73)$$

Подставляя выражение (6.72) в уравнение (6.73), получаем

$$\Delta \varphi = -4\pi \sum_a q_a n_a \exp \left(-\frac{q_a \varphi}{\kappa T_a} \right) - 4\pi q \delta(\mathbf{r}). \quad (6.74)$$

На больших расстояниях $|q_a\phi| \ll \kappa T_a$. Поэтому, разлагая экспоненту в ряд Тейлора и ограничиваясь линейными членами, находим при учете условия (6.73) выражение

$$\Delta\varphi - \frac{1}{r_D^2}\varphi = -4\pi q\delta(\mathbf{r}), \quad (6.75)$$

где радиус экранирования кулоновского взаимодействия r_D определен соотношением

$$r_D = \left(\sum_a \frac{4\pi q_a^2 n_a}{\kappa T_a} \right)^{-1/2}.$$

Уравнение (6.75) можно решать разложением в интеграл Фурье:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int \frac{dk}{(2\pi)^3} \varphi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (6.76)$$

В этом случае вместо (6.75) имеем

$$\left(-k^2 - \frac{1}{r_D^2} \right) \varphi(\mathbf{k}) = -4\pi q, \text{ откуда } \varphi(\mathbf{k}) = \frac{4\pi q}{k^2 + \frac{1}{r_D^2}}.$$

С помощью (6.76) получаем для потенциала $\phi(\mathbf{r})$ формулу $\varphi(\mathbf{r}) = \frac{q}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_D}\right)$.

10. Рассмотрите возможность существования продольных колебаний в электрон-ионной системе классической двухкомпонентной плазмы. Определите собственные частоты колебаний и их затухание.

Решение. Запишем кинетические уравнения Власова для электронной и ионной компонент плазмы в линейном по возмущению приближении, удерживая «след» интеграла столкновений в приближении времени релаксации

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta f^{(\alpha)} + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \delta f^{(\alpha)} + e_\alpha \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v}\mathbf{B}] \right) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_0^{(\alpha)} = -\varepsilon \delta f^{(\alpha)}. \quad (6.77)$$

Здесь $\varepsilon \rightarrow +0$, \mathbf{E} и \mathbf{B} — соответственно напряженность электрического поля и индукция магнитного поля, создаваемых частицами системы. Если равновесная функция распределения $f_0^{(\alpha)}$ является изотропной функцией импульса, то магнитное поле выпадает из уравнения (6.77).

Действительно, в этом случае

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_0^{(\alpha)} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon(\mathbf{p})} f_0^{(\alpha)} \mathbf{v}, \quad (6.78)$$

и смешанное произведение $[\mathbf{v}\mathbf{B}]\mathbf{v}$ обращается в нуль вследствие ортогональности векторов, фигурирующих в скалярном произведении. В силу линейности уравнения (6.77) по возмущению достаточно рассмотреть только одну фурье-компоненту. Поэтому, подставляя в уравнения (6.77) возмущения всех величин в виде

$$\mathbf{E}(rt) = \mathbf{E}(\mathbf{k}\omega) e^{i\mathbf{k}r - i\omega t},$$

перепишем их следующим образом:

$$(\omega + i\varepsilon - \mathbf{k}\mathbf{v}) \delta f^{(\alpha)}(\mathbf{p}, \mathbf{k}\omega) = -ie_\alpha \mathbf{E}(\mathbf{k}\omega) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_0^{(\alpha)}(\mathbf{p}). \quad (6.79)$$

Продольные колебания в плазме соответствуют потенциальному полю: $\mathbf{E} = -\nabla\phi$. Потенциал ϕ удовлетворяет уравнению Пуассона, которое в (\mathbf{k}, ω) -представлении имеет вид

$$k^2 \phi(\mathbf{k}\omega) = 4\pi \rho(\mathbf{k}\omega). \quad (6.80)$$

Плотность заряда $\rho(\mathbf{k}\omega)$ выражается через функции распределения частиц:

$$\rho(\mathbf{k}\omega) = \sum_{\alpha} e_{\alpha} \int d\mathbf{p} \delta f^{(\alpha)}(\mathbf{p}, \mathbf{k}\omega). \quad (6.81)$$

Выражая из уравнения (6.79) $\delta f^{(\alpha)}$ и учитывая потенциальный характер электрического поля, получаем с помощью (6.80) и (6.81) дисперсионное уравнение для спектра продольных колебаний двухкомпонентной плазмы, состоящей из электронов ($e_e = -e$) и однозарядных ионов ($e_i = e$):

$$1 + \frac{4\pi e^2}{k^2} \int d\mathbf{p} \frac{\mathbf{k} \frac{\partial f_0^{(e)}}{\partial \mathbf{p}}}{\omega + i\varepsilon - \mathbf{k}\mathbf{v}} + \frac{4\pi e^2}{k^2} \int d\mathbf{p} \frac{\mathbf{k} \frac{\partial f_0^{(i)}}{\partial \mathbf{p}}}{\omega + i\varepsilon - \mathbf{k}\mathbf{v}} = 0. \quad (6.82)$$

Взяв в качестве равновесных функций распределения максвелловские функции

$$f_0^{(\alpha)}(\mathbf{p}) = \frac{n_{\alpha}}{(2\pi m_{\alpha} \kappa T_{\alpha})^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{\mathbf{p}^2}{2m_{\alpha} \kappa T_{\alpha}}\right)$$

и используя формулу (6.78), можно записать дисперсионное уравнение (6.82) в таком виде:

$$1 - \frac{4\pi e^2}{k^2 \kappa} \left(\frac{1}{T_e} \int d\mathbf{p} \frac{f_0^{(e)} \mathbf{k}\mathbf{v}}{\omega + i\varepsilon - \mathbf{k}\mathbf{v}} + \frac{1}{T_i} \int d\mathbf{p} \frac{f_0^{(i)} \mathbf{k}\mathbf{v}}{\omega + i\varepsilon - \mathbf{k}\mathbf{v}} \right) = 0. \quad (6.83)$$

Рассмотрим высокочастотные колебания, фазовая скорость которых много больше характерных значений тепловых скоростей электронов и ионов, существенно представленных в системе: $\langle v_e \rangle, \langle v_i \rangle \ll \omega/k$. В этом случае, удерживая вещественную часть в (6.83), вычисляем интегралы следующим образом:

$$\begin{aligned} I^{(\alpha)} &\equiv \int d\mathbf{p} f_0^{(\alpha)} \frac{\mathbf{k}\mathbf{v}}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}} \approx \frac{1}{\omega} \int d\mathbf{p} f_0^{(\alpha)} \left(1 + \frac{\mathbf{k}\mathbf{v}}{\omega} \right) \mathbf{k}\mathbf{v} = \\ &= \frac{1}{\omega^2} \int d\mathbf{p} (\mathbf{k}\mathbf{v})^2 f_0^{(\alpha)}(\mathbf{p}). \end{aligned}$$

Вводим сферическую систему координат в пространстве импульсов с полярной осью, направленной вдоль вектора \mathbf{k} . Интеграл по модулю импульса приводит к $\Gamma(5/2)$, и в результате находим

$$I^{(\alpha)} = \kappa T_\alpha \frac{k^2}{\omega^2 m_\alpha}. \quad (6.84)$$

Теперь с помощью (6.83) получаем уравнение для частоты колебаний:

$$1 - \frac{4\pi n e^2}{\omega^2 m_e} - \frac{4\pi n e^2}{\omega^2 m_i} = 0,$$

откуда с учетом неравенства $\frac{m_e}{m_i} \ll 1$ имеем

$$\omega^2 = \omega_p^2, \quad \omega_p^2 = 4\pi n \frac{e^2}{m_e}. \quad (6.85)$$

Очевидно, что такой же результат получится в модели однокомпонентной электронной плазмы, электронейтральность которой обеспечивается однородным положительно заряженным фоном. В двухкомпонентной плазме есть еще одна ветвь продольных колебаний, причем фазовая скорость волны $\frac{\omega}{k}$ лежит в промежутке между характерными тепловыми скоростями электронов и ионов:

$$\langle v_i \rangle \ll \frac{\omega}{k} \ll \langle v_e \rangle.$$

Для $I^{(i)}$ можно по-прежнему воспользоваться соотношением (6.84), а для $I^{(e)}$ имеем

$$I^{(e)} = \int d\mathbf{p} f_0^{(e)} \frac{\mathbf{k}\mathbf{v}}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}} = - \int d\mathbf{p} f_0^{(e)} \frac{1}{1 - \frac{\omega}{\mathbf{k}\mathbf{v}}} = - \int d\mathbf{p} f_0^{(e)} = -n.$$

Теперь дисперсионное уравнение принимает вид

$$1 - \frac{4\pi n e^2}{\omega^2 m_i} + \frac{4\pi n e^2}{k^2 \kappa T_e} = 0,$$

откуда

$$\omega_i^2 = \frac{4\pi n e^2}{m_i} \frac{1}{1 + \frac{4\pi n e^2}{k^2 \kappa T_e}}. \quad (6.86)$$

При $\omega^2 \ll \omega_{p_i}^2 = 4\pi n \frac{e^2}{m_i}$ формула (6.86) дает

$$\omega^2 = \frac{\kappa T_e}{m_i} k^2. \quad (6.87)$$

Это так называемый ионный звук. Акустический закон дисперсии обусловлен динамическим экранированием электронами кулоновского взаимодействия ионов. При $k > \frac{1}{r_{D_e}} = \sqrt{\frac{\kappa T_e}{4\pi n e^2}}$ из (6.86) имеем

$$\omega^2 = \omega_{p_i}^2.$$

На малых расстояниях, когда длина волны $\lambda \sim 1/k$ возмущения меньше дебаевского радиуса экранирования, экранировка отсутствует, и ионы совершают плазменные колебания с частотой ω_{p_i} .

Для определения затухания найденных ветвей колебаний следует воспользоваться формулой Сохоцкого

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x)$$

при вычислении интегралов в (6.83). Тогда, используя формулу Ландау (6.12), найдем для ветви колебаний (6.85)

$$\gamma = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\omega_p}{k r_{D_e}} \exp\left(- (2k^2 r_{D_e}^2)^{-1}\right).$$

Для ветви акустических колебаний указанная процедура приводит к результату

$$\gamma = \Omega \left(\frac{\pi m_e}{8m_i}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

11. Получите уравнение для одночастичной квантовой функции распределения Вигнера $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$, используя уравнение Неймана для одночастичной матрицы плотности ρ

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [H, \rho] = 0, \quad (6.88)$$

где H — одночастичный оператор энергии.

Решение. Раскрывая в явном виде коммутатор $[H, \rho] = H\rho - \rho H$, запишем (6.88) в координатном представлении:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{r} | \rho | \mathbf{r}' \rangle + \frac{i}{\hbar} (\langle \mathbf{r} | H \rho | \mathbf{r}' \rangle - \langle \mathbf{r} | \rho H | \mathbf{r}' \rangle) = 0. \quad (6.89)$$

Учитывая полноту базиса разложения

$$\int d\mathbf{r}'' |\mathbf{r}''\rangle \langle \mathbf{r}''| = 1,$$

где $|\mathbf{r}''\rangle$ — дираковский вектор состояния, перепишем (6.89) в виде

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{r} | \rho | \mathbf{r}' \rangle + \\ & + \frac{i}{\hbar} \int d\mathbf{r}'' (\langle \mathbf{r} | H | \mathbf{r}'' \rangle \langle \mathbf{r}'' | \rho | \mathbf{r}' \rangle - \langle \mathbf{r} | \rho | \mathbf{r}'' \rangle \langle \mathbf{r}'' | H | \mathbf{r}' \rangle) = 0. \end{aligned} \quad (6.90)$$

В силу эрмитовости оператора энергии $\langle \mathbf{r}'' | H | \mathbf{r}' \rangle = \langle \mathbf{r}' | H^* | \mathbf{r}'' \rangle$, где звездочкой обозначено комплексное сопряжение. В собственном представлении любой оператор диагонален. Поэтому справедливо равенство

$$\langle \mathbf{r} | H | \mathbf{r}' \rangle = H(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Теперь уравнение (6.90) переписывается следующим образом:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(\mathbf{r}) + H^*(\mathbf{r}') \right) \langle \mathbf{r} | \rho | \mathbf{r}' \rangle = 0. \quad (6.91)$$

В подробной записи имеем

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 - \nabla_1^2) - U(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}') \right) \langle \mathbf{r} | \rho | \mathbf{r}' \rangle = 0,$$

где U — оператор потенциальной энергии (например, потенциал самосогласованного поля). Подставляя сюда выражение для $\langle \mathbf{r} | \rho | \mathbf{r}' \rangle$ через квантовую функцию распределения Вигнера

$$\langle \mathbf{r} | \rho | \mathbf{r}' \rangle = \int d\mathbf{p} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')\right) f\left(\frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}, t\right),$$

совершая замену переменных $\mathbf{r} - \mathbf{r}' = \hbar\boldsymbol{\tau}$, $\frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2} = \mathbf{R}$ и учитывая равенство $\nabla^2 - \nabla_1^2 = \frac{2\nabla_{\mathbf{R}}\nabla_{\boldsymbol{\tau}}}{\hbar}$, получим

$$\int d\mathbf{p}' \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar}{m} \nabla_{\mathbf{R}} \nabla_{\boldsymbol{\tau}} - U \left(\mathbf{R} + \frac{\hbar\boldsymbol{\tau}}{2} \right) + U \left(\mathbf{R} - \frac{\hbar\boldsymbol{\tau}}{2} \right) \right] e^{i\mathbf{p}'\boldsymbol{\tau}} f(\mathbf{R}, \mathbf{p}', t) = 0,$$

или

$$\int d\mathbf{p}' \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar \frac{\mathbf{p}'}{m} \nabla_{\mathbf{R}} - U \left(\mathbf{R} + \frac{\hbar\boldsymbol{\tau}}{2} \right) + U \left(\mathbf{R} - \frac{\hbar\boldsymbol{\tau}}{2} \right) \right] e^{i\mathbf{p}'\boldsymbol{\tau}} f(\mathbf{R}, \mathbf{p}', t) = 0.$$

Умножая это уравнение на $\frac{\exp(-i\mathbf{p}\boldsymbol{\tau})}{(2\pi)^3}$ и интегрируя по $\boldsymbol{\tau}$, найдем

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \nabla_{\mathbf{R}} \right) f(\mathbf{R}, \mathbf{p}, t) &= \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int \frac{d\boldsymbol{\tau} d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} \left[U \left(\mathbf{R} + \frac{\hbar\boldsymbol{\tau}}{2} \right) - U \left(\mathbf{R} - \frac{\hbar\boldsymbol{\tau}}{2} \right) \right] e^{i(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\boldsymbol{\tau}} f(\mathbf{R}, \mathbf{p}', t). \end{aligned} \quad (6.92)$$

Уравнение (6.92) — это квантовое кинетическое уравнение в приближении одночастичного гамильтониана (например, в приближении самосогласованного поля). Это квантовый аналог уравнения Власова. Уравнение (6.92) особенно удобно для получения разложений по степеням \hbar . В низшем приближении, ограничиваясь линейными по $\hbar\boldsymbol{\tau}$ членами в разложении потенциальной энергии U в ряд Тейлора, приходим к классическому уравнению Власова.

Действительно, в этом случае правая часть уравнения (6.92) равна

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} \int \frac{d\boldsymbol{\tau} d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{R}} \hbar\boldsymbol{\tau} e^{i\hbar(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\boldsymbol{\tau}} f(\mathbf{R}, \mathbf{p}', t) &= \\ &= - \int \frac{d\boldsymbol{\tau} d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{R}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} e^{i(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\boldsymbol{\tau}} f(\mathbf{R}, \mathbf{p}', t) = \\ &= - \int d\mathbf{p}' \frac{\partial U}{\partial \mathbf{R}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) f(\mathbf{R}, \mathbf{p}', t) = \frac{\partial U}{\partial \mathbf{R}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}}. \end{aligned}$$

Уравнение (6.92) принимает вид

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \nabla_{\mathbf{R}} - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{R}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) f(\mathbf{R}, \mathbf{p}, t) = 0.$$

12. Используя линеаризованное по возмущению квантовое кинетическое уравнение для функции распределения Вигнера в приближении самосогласованного поля

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \nabla_{\mathbf{R}} \right) \delta f(\mathbf{R}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{i\hbar} \int \frac{d\mathbf{p}' d\boldsymbol{\tau}}{(2\pi)^3} e^{i(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\boldsymbol{\tau}} f_0(\mathbf{p}') \times \\ \times \left[U_{\text{эф}} \left(\mathbf{R} + \frac{\hbar\boldsymbol{\tau}}{2}, t \right) - U_{\text{эф}} \left(\mathbf{R} - \frac{\hbar\boldsymbol{\tau}}{2}, t \right) \right], \quad (6.93)$$

где

$$U_{\text{эф}}(\mathbf{R}, t) = \int \frac{d\mathbf{R}'}{d} \mathbf{p} (2\pi\hbar)^3 v(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \delta f(\mathbf{R}', \mathbf{p}, t), \quad (6.94)$$

v — потенциал межчастичного взаимодействия, рассмотрите спектр коллективных возбуждений в вырожденной ферми-системе. Сравните результаты для кулоновской системы, когда $v(\mathbf{R}) = \frac{e^2}{R}$, и системы нейтральных частиц, взаимодействующих посредством короткодействующего потенциала.

Решение. Для определения спектра коллективных возбуждений системы необходимо с помощью (6.93) и (6.94) получить дисперсионное уравнение. Отметим, что в случае системы нейтральных частиц это будут продольные колебания, характерные для пространственно однородной системы. Для системы заряженных частиц это также будут продольные колебания, поскольку соотношение (6.94) при подстановке в него выражения $v(\mathbf{R}) = \frac{e^2}{R}$ превращается в решение уравнения Пуассона.

В силу линейности уравнений каждую фурье-компоненту возмущения можно рассматривать независимо. Поэтому выберем возмущение в виде

$$\delta f(\mathbf{R}, \mathbf{p}, t) = \delta f(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R} - i\omega t}.$$

Уравнение (6.93) теперь переписывается следующим образом:

$$\left(\omega - \frac{\mathbf{k}\mathbf{p}}{m} \right) \delta f(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\hbar} \left[f_0 \left(\mathbf{p} - \frac{\hbar\mathbf{k}}{2} \right) - f_0 \left(\mathbf{p} + \frac{\hbar\mathbf{k}}{2} \right) \right] U_{\text{эф}}(\mathbf{k}, \omega). \quad (6.95)$$

В выражении (6.94) стоит свертка по \mathbf{R}' величин $v(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ и $\delta f(\mathbf{R}')$, которая приводит к произведению их фурье-образов:

$$U_{\text{эф}}(\mathbf{k}\omega) = v(\mathbf{k}) \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \delta f(\mathbf{p}, \mathbf{k}\omega). \quad (6.96)$$

Находим $\delta f(\mathbf{p}', \mathbf{k}\omega)$ из (6.95) и подставляем в соотношение (6.96). Приходим к дисперсионному уравнению

$$1 - v(\mathbf{k})P(\mathbf{k}\omega) = 0, \quad (6.97)$$

где поляризационный оператор $P(\mathbf{k}\omega)$ определен выражением

$$P(\mathbf{k}\omega) = \frac{1}{\hbar} \int \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3} \frac{f_0\left(\mathbf{p} - \frac{\hbar\mathbf{k}}{2}\right) - f_0\left(\mathbf{p} + \frac{\hbar\mathbf{k}}{2}\right)}{\omega - \frac{\mathbf{k}\mathbf{p}}{m}}. \quad (6.98)$$

Для вырожденной ферми-системы равновесная функция распределения — это фермиевская ступенька. При этом

$$f_0\left(\mathbf{p} - \frac{\hbar\mathbf{k}}{2}\right) - f_0\left(\mathbf{p} + \frac{\hbar\mathbf{k}}{2}\right) \approx \frac{\hbar\mathbf{k}\mathbf{p}}{m} \delta\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{p_F^2}{2m}\right).$$

Интеграл в (6.98) легко вычисляется. Для $\omega = \omega + i\varepsilon$, где $\varepsilon \rightarrow +0$, получаем

$$P(\mathbf{k}\omega) = -\frac{mp_F}{\pi^2\hbar^3} \left\{ 1 + \frac{m\omega}{2kp_F} \left[\ln \left| \frac{kp_F - m\omega}{kp_F + m\omega} \right| + i\pi\theta(kp_F - m\omega) \right] \right\}, \quad (6.99)$$

где p_F — импульс Ферми, а $\theta(x)$ — ступенчатая функция:

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Для исследования дисперсионного уравнения (6.97) удобно ввести безразмерные переменные

$$x = \frac{kp_F}{m\omega}, \quad q = \frac{mp_F}{\pi^2\hbar^3}.$$

Теперь вещественная часть уравнения (6.97) записывается следующим образом:

$$\left(2 + \frac{2}{v(k)q}\right) x = \ln \left| \frac{x+1}{x-1} \right|. \quad (6.100)$$

Уравнение (6.100) удобно представить графически. График логарифма выходит из нуля с тангенсом угла наклона касательной,

равным двум, а тангенс угла наклона прямой $\left(2 + \frac{2}{v(k)q}\right)x$ при $v(k) > 0$ (что соответствует отталкиванию частиц друг от друга) больше двух и становится равным двум при $v(k) \rightarrow \infty$. Как видно из рис. 6.1, уравнение (6.100) имеет три корня. Корень $x = 0$ физического смысла не имеет. Корень, обозначенный точкой 2, соответствует затухающим по Ландау колебаниям, ибо при $x > 1$ в уравнении (6.97) отлична от нуля и не мала мнимая часть. Корень, обозначенный точкой 1, соответствует не затухающим по Ландау колебаниям в системе.

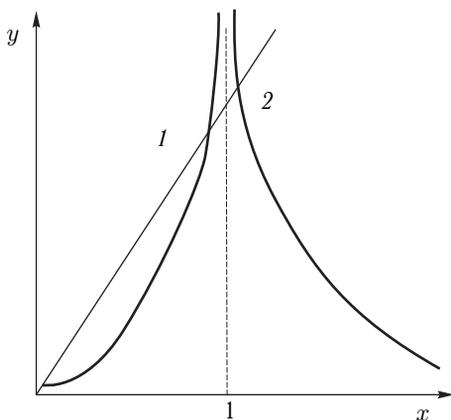


Рис. 6.1. Графическое решение уравнения (6.100)

Рассмотрим его поведение в зависимости от вида потенциала взаимодействия $v(k)$. Если $v(k)$ стремится к положительной константе при $k \rightarrow \infty$ (короткодействующий потенциал) и $v(k)q \leq 1$, то пересечение графиков логарифма и прямой происходит в непосредственной близости $x = 1$.

Из уравнения (6.100) в этом случае находим для частоты колебаний

$$\omega = \frac{kp_F}{m} \left\{ 1 + 2 \exp \left[- \left(2 + \frac{2}{v(k)q} \right) \right] \right\}. \quad (6.101)$$

Эта ветвь спектра коллективных возбуждений вырожденной ферми-системы нейтральных частиц представляет собой нулевой звук Ландау, который существует в системах с отталкивательным взаимодействием между частицами. Подчеркнем, что исходное уравнение соответствует приближению $\omega\tau \gg 1$ (τ — время релаксации), когда столкновения не играют существенной роли в процессе распространения колебаний, в то время как в обыч-

ном звуке (при $\omega\tau \ll 1$) столкновения успевают устанавливать термодинамическое равновесие в каждом малом по сравнению с длиной волны λ элементе объема жидкости. В случае кулоновского потенциала $v(k) = \frac{4\pi e^2}{k^2} \rightarrow \infty$ при $k \rightarrow 0$. Точка 1 при этом смещается в область $x \geq 0$. Проводя в (6.100) разложение логарифма, получаем

$$\omega^2 = \frac{4\pi n e^2}{m} + \frac{3}{5} \frac{p_F^2}{m^2} k^2, \quad (6.102)$$

где $p_F^3 = \hbar^3 \cdot 3\pi^2 n$. Формула (6.102) определяет квадрат частоты плазменных колебаний, главное значение которой оказывается таким же, как и у классической системы. С ростом k точка пересечения поднимается вверх. Исследование уравнения (6.100) показывает, что при выполнении условия

$$\left(\frac{4m e^2}{\pi \hbar p_F} \right)^{\frac{1}{2}} \ll \frac{k}{p_F} \ll 1$$

в системе возможны колебания с практически линейным по волновому числу законом дисперсии

$$\omega = \frac{k p_F}{m} \left\{ 1 + 2 \exp \left[-2 \left(1 + \frac{\pi k^2}{4m e^2 p_F} \right) \right] \right\}.$$

Таким образом, плазменные колебания в системе заряженных частиц соответствуют нуль-звуковой моде колебаний в нейтральных системах. При $k \rightarrow 0$ линейный спектр, характерный для нейтральных систем, заменяется фактически постоянной частотой. Математически это различие обусловлено сингулярным характером кулоновского потенциала.

13. Используя уравнение (6.4) для одночастичной матрицы плотности в координатном представлении, получить квантовое кинетическое уравнение для функции распределения Вигнера для электронной системы металлических пленок в условиях квантового размерного эффекта, когда движение электронов поперек пленки квантуется размерами образца.

Решение. В рассматриваемом случае система не является пространственно однородной в направлении поперек пленки,

поэтому определенная обычным образом функция Вигнера будет зависеть от поперечной координаты даже в равновесии. Представим оператор потенциальной энергии электрона в пленке в виде суммы двух частей:

$$U(\mathbf{r}t) = U(z) + \delta U(\mathbf{r}t), \quad (6.103)$$

где $U(z)$ — эффективное поле, действующее на электрон в равновесном состоянии, складывающееся из кристаллического пленочного потенциала и самосогласованного равновесного поля электронов, а δU — неравновесная добавка к эффективному полю.

Уравнение для одночастичной матрицы плотности $\langle \mathbf{r} | \rho | \mathbf{r}' \rangle$ в координатном представлении (6.4) теперь можно представить в виде

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 - \nabla_1^2) - U(z) + U(z') - \delta U(\mathbf{r}t) + \delta U(\mathbf{r}'t) \right] \langle \mathbf{r} | \rho | \mathbf{r}' \rangle = 0. \quad (6.104)$$

В равновесии движение электронов поперек пленки описывается уравнением Шрёдингера с потенциалом $U(z)$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + U(z) \right) \psi_l(z) = \varepsilon_l \psi_l(z). \quad (6.105)$$

Вводим новые двумерные переменные в плоскости пленки:

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{r}} + \tilde{\mathbf{r}}'), \quad \hbar \boldsymbol{\tau} = \tilde{\mathbf{r}} - \tilde{\mathbf{r}}',$$

где $\mathbf{r} = (\tilde{\mathbf{r}}, z)$. Представим матричный элемент $\langle \mathbf{r} | \rho | \mathbf{r}' \rangle$ в виде интеграла Фурье по переменным, лежащим в плоскости пленки, и двойного ряда Фурье по функциям $\psi_l(z)$ из (6.105):

$$\langle \mathbf{r} | \rho | \mathbf{r}' \rangle = \sum_{s,t} \psi_s(z) \psi_t^*(z') \times \\ \times \int d\mathbf{p}' \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' (\tilde{\mathbf{r}} - \tilde{\mathbf{r}}')\right) f_{st}\left(\frac{\tilde{\mathbf{r}} + \tilde{\mathbf{r}}'}{2}, \mathbf{p}', t\right). \quad (6.106)$$

Здесь \mathbf{p}' — двумерный вектор импульса, параллельного плоскости пленки. Подставляем выражение (6.106) в (6.104). Умножаем получившееся соотношение на $\psi_l^*(z) \psi_n(z') \frac{\exp(-i\mathbf{p}\boldsymbol{\tau})}{(2\pi)^2}$ и интегрируем по $\boldsymbol{\tau}$, z и z' . С учетом уравнения (6.105) получаем

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \nabla_{\mathbf{R}} + i(\varepsilon_l - \varepsilon_n) \right) f_{ln}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, t) = \\ & = \frac{1}{i\hbar} \int \frac{d\boldsymbol{\tau} d\mathbf{p}'}{(2\pi)^2} e^{i(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\boldsymbol{\tau}} \sum_s \left[\delta U_{ls} \left(\mathbf{R} + \frac{\hbar\boldsymbol{\tau}}{2}, t \right) f_{sn}(\mathbf{R}, \mathbf{p}', t) - \right. \\ & \quad \left. - f_{ls}(\mathbf{R}, \mathbf{p}', t) \delta U_{sn} \left(\mathbf{R} - \frac{\hbar\boldsymbol{\tau}}{2}, t \right) \right], \quad (6.107) \end{aligned}$$

где

$$\delta U_{ln}(\mathbf{R}, t) = \int dz \psi_l^*(z) \delta U(\mathbf{R}, z, t) \psi_n(z). \quad (6.108)$$

Рассмотрим уравнение, получающееся из (6.70) при линейризации по отклонению от равновесия:

$$f_{ln}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, t) = f_{ln}(\mathbf{p}) + \delta f_{ln}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, t).$$

В нулевом приближении из (6.107) имеем

$$(\varepsilon_l - \varepsilon_n) f_{ln}(\mathbf{p}) = 0,$$

откуда

$$f_{ln}(\mathbf{p}) = f_l(\mathbf{p}) \delta_{ln}. \quad (6.109)$$

В линейном по возмущению приближении из (6.107) с учетом равенства (6.109) имеем

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \nabla_{\mathbf{R}} + i(\varepsilon_l - \varepsilon_n) \right) \delta f_{ln}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{i\hbar} \int \frac{d\boldsymbol{\tau} d\mathbf{p}'}{(2\pi)^2} e^{i(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\boldsymbol{\tau}} \times \\ & \times \left[\delta U_{ln} \left(\mathbf{R} + \frac{\hbar\boldsymbol{\tau}}{2}, t \right) f_n(\mathbf{p}') - f_l(\mathbf{p}') \delta U_{ln} \left(\mathbf{R} - \frac{\hbar\boldsymbol{\tau}}{2}, t \right) \right]. \quad (6.110) \end{aligned}$$

Рассматривая одну фурье-компоненту возмущения

$$\delta U_{ln}(\mathbf{R}, t) = \delta U_{ln}(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R} - i\omega t},$$

что соответствует плоской волне в направлении вдоль пленки и произвольной зависимости от поперечной координаты, получим с помощью уравнения (6.103)

$$\begin{aligned} & \left(\omega - \frac{\mathbf{k}\mathbf{p}}{m} - \varepsilon_l + \varepsilon_n \right) \delta f_{ln}(\mathbf{p}, \mathbf{k}\omega) = \\ & = \left[f_n \left(\mathbf{p} - \frac{\hbar\mathbf{k}}{2} \right) - f_l \left(\mathbf{p} + \frac{\hbar\mathbf{k}}{2} \right) \right] \delta U_{ln}(\mathbf{k}, \omega). \quad (6.111) \end{aligned}$$

В приближении самосогласованного поля величина $\delta U_{ln}(\mathbf{k}, \omega)$ при кулоновском потенциале межчастичного взаимодействия представляет собой решение уравнения Пуассона. Поэтому ана-

логично (6.94) и (6.96) в выбранном здесь представлении ее можно записать в следующем виде:

$$\delta U_{ln}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{r,s} B_{lnrs}(\mathbf{k}) \int \frac{dp}{(2\pi\hbar)^2} \delta f_{rs}(\mathbf{p}, \mathbf{k}\omega), \quad (6.112)$$

где $B_{lnrs}(\mathbf{k})$ — матричный элемент двумерного фурье-образа кулоновского потенциала межчастичного взаимодействия $v(|z|, \mathbf{k})$:

$$B_{lnrs}(\mathbf{k}) = \int dz dz_1 \psi_l(z) \psi_n^*(z) v(|z - z_1|, \mathbf{k}) \psi_r(z_1) \psi_s^*(z_1). \quad (6.113)$$

Двумерный фурье-образ потенциала взаимодействия определен равенством

$$v(|z|, \mathbf{k}) = \int d\mathbf{R} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} v(|z|, \mathbf{R}) = \int d\mathbf{R} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} \frac{e^2}{(z^2 + R^2)^{\frac{1}{2}}}. \quad (6.114)$$

Система уравнений (6.111) вместе с равенствами (6.112)–(6.114) может служить основой для описания неравновесных явлений в тонких пленках, в частности для определения ветвей продольных колебаний спектра коллективных возбуждений системы.

14. Определите спектр продольных колебаний электрон-ионной системы (ионный звук) размерно-квантованной металлической пленки.

Решение. Для получения дисперсионного уравнения воспользуемся квантовым кинетическим уравнением (6.111). При учете ионной системы кристалла действующее на электроны эффективное поле состоит из двух вкладов — электронного и ионного. Поэтому для $\delta U_{ln}(\mathbf{k}, \omega)$ имеем

$$\delta U_{ln}(\mathbf{k}, \omega) = \delta U_{ln}^{\text{эл}}(\mathbf{k}, \omega) + \delta U_{ln}^{\text{ион}}(\mathbf{k}, \omega). \quad (6.115)$$

Разумеется, движение ионов не квантуется даже в самых тонких пленках. Однако для единообразия выкладок при изучении двухкомпонентной системы удобно рассматривать электроны и ионы в одинаковом представлении. В этом случае, считая ионы для определенности однозарядными, будем иметь формулы типа (6.111)–(6.114) как для электронных, так и для ионных характеристик системы.

Дисперсионное уравнение для определения спектра продольных колебаний в системе получается с помощью соотношений (6.111)–(6.114) и соответствующих выражений для ионов в виде

условия существования нетривиальных решений у бесконечной однородной системы линейных алгебраических уравнений

$$\delta U_{nr}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{s,t} \left[B_{nrst}^{\text{эл}}(\mathbf{k}) \prod_{st}^{\text{эл}}(\mathbf{k}\omega) + B_{nrst}^{\text{ион}}(\mathbf{k}) \prod_{st}^{\text{ион}}(\mathbf{k}\omega) \right] \delta U_{st}(\mathbf{k}, \omega). \quad (6.116)$$

При этом, например, выражение для электронного поляризационного оператора $\prod_{nr}^{\text{эл}}(\mathbf{k}, \omega)$ имеет вид

$$\prod_{nr}^{\text{эл}}(\mathbf{k}\omega) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^2} \frac{f_r\left(\mathbf{p} - \frac{\hbar\mathbf{k}}{2}\right) - f_n\left(\mathbf{p} + \frac{\hbar\mathbf{k}}{2}\right)}{\omega - \frac{\mathbf{k}\mathbf{p}}{m_{\text{эл}}} - \varepsilon_n + \varepsilon_r}. \quad (6.117)$$

Решение дисперсионного уравнения в общем виде сводится к исследованию определителя бесконечного порядка и представляет собой сложную задачу. Эта задача существенно упрощается в длинноволновом приближении, когда $kL \ll 1$, где L — толщина пленки.

Вычислим прежде всего двумерный фурье-образ кулоновского потенциала межчастичного взаимодействия, определяемый формулой (6.114). Фигурирующий там интеграл вычисляется с помощью интегрального представления функций Бесселя I_n

$$I_n(a) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-ia \sin \varphi - in\varphi}$$

и формулы преобразования Ганкеля первого порядка

$$\int_0^{\infty} \frac{dx x I_0(xy)}{(x^2 + c^2)^{\frac{1}{2}}} = \frac{e^{-cy}}{y}, \quad \text{Re } c > 0, \quad y > 0.$$

В результате имеем

$$v(|z|, \mathbf{k}) = \frac{2\pi e^2}{k} e^{-k|z|}. \quad (6.118)$$

При $kL \ll 1$ экспоненту в формуле (6.118) можно заменить единицей. Тогда при любом выборе равновесного потенциала в пленке $U(z)$ (и, следовательно, волновых функций $\psi_l(z)$) имеем, на пример, с помощью (6.113)

$$B_{nrst}^{\text{эл}}(\mathbf{k}) = \frac{2\pi e^2}{k} \delta_{nr} \delta_{st}.$$

Теперь бесконечная система уравнений (6.116) приводит к дисперсионному уравнению

$$\frac{2\pi e^2}{k} \sum_s \left[\prod_{ss}^{\text{эл}}(\mathbf{k}\omega) + \prod_{ss}^{\text{ион}}(\mathbf{k}\omega) \right] = 1. \quad (6.119)$$

Фазовая скорость ионного звука $\frac{\omega}{k}$ лежит в промежутке между характерными скоростями движения электронов и ионов

$$\frac{p}{m_{\text{ион}}} \ll \frac{\omega}{k} \ll \frac{p}{m_{\text{эл}}}.$$

При вычислении ионного поляризационного оператора $\prod_{nn}^{\text{ион}}(\mathbf{k}\omega)$ раскладываем равновесные ионные функции распределения f_n в ряд Тейлора по степеням k и учитываем, что средняя равновесная концентрация электронов n_s , находящихся на s -м пленочном уровне, равна

$$n_s = \frac{1}{L} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^2} f_s(\mathbf{p}). \quad (6.120)$$

При выполнении условия $\frac{k\mathbf{p}}{m_{\text{ион}}\omega} \ll 1$ получаем

$$\sum_s \prod_{ss}^{\text{ион}}(\mathbf{k}\omega) = \frac{nL}{m_{\text{ион}}\omega^2} k^2, \quad (6.121)$$

где n — концентрация заряженных частиц, одинаковая для электронов и ионов.

Вычисление электронного поляризационного оператора при условии $\frac{k\mathbf{p}}{m_{\text{эл}}\omega} \gg 1$ приводит с учетом равенства (6.120) к следующему результату:

$$\sum_s \prod_{ss}^{\text{эл}}(\mathbf{k}\omega) = -L \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right)_T, \quad (6.122)$$

где μ — химический потенциал системы электронов. Концентрация электронов n при абсолютном нуле температуры определяется соотношением, следующим из (6.120) после вычисления интеграла по импульсной переменной:

$$n = \frac{m_{\text{эл}}}{\pi L \hbar^2} \sum_{n=1}^{n_F} (\mu - \varepsilon_n), \quad (6.123)$$

где n_F — число заполненных энергетических уровней в пленке. Поэтому с помощью (6.122) получаем

$$\sum_s \prod_{ss}^{\text{эл}}(\mathbf{k}\omega) = -\frac{m_{\text{эл}}\pi n_F}{\pi L \hbar^2}. \quad (6.124)$$

Закон дисперсии ионно-звуковых колебаний, получаемый при подстановке выражений (6.121) и (6.124) в дисперсионное уравнение (6.119), имеет вид

$$\omega^2 = \frac{\pi \hbar^2 n L}{m_{\text{эл}} m_{\text{ион}} n_F} k^2. \quad (6.125)$$

Скорость распространения таких колебаний в условиях размерного квантования движения носителей оказывается, как видно из (6.125), осциллирующей функцией толщины пленки. Действительно, с ростом L скачками увеличивается число заполненных при абсолютном нуле температуры пленочных энергетических уровней n_F .

15. На основе уравнений (6.73) и (6.83) рассмотрите вопрос о природе бесстолкновительного затухания Ландау. Покажите, что в пренебрежении столкновениями частиц плазмы можно для любого значения волнового числа k получить решение, осциллирующее с любой желаемой частотой $\omega = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}$ без затухания (это так называемая волна Ван-Кампена).

Решение. Уравнение (6.73) — это неоднородное уравнение. Поэтому к любому решению этого уравнения можно прибавить решение однородного уравнения

$$(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) \delta f(\mathbf{p}, \mathbf{k}\omega) = 0, \quad (6.126)$$

которое получается для однокомпонентной плазмы с помощью уравнения Власова при вещественной частоте ω . В результате для $\delta f(\mathbf{p}, \mathbf{k}\omega)$ получается решение, которое можно записать следующим образом:

$$\delta f(\mathbf{p}, \mathbf{k}\omega) = -\frac{e\mathbf{k} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}}}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}} \varphi(\mathbf{k}\omega) + \lambda(\mathbf{k}\omega) \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}), \quad (6.127)$$

где $\lambda(\mathbf{k}\omega)$ — произвольная функция переменных \mathbf{k} и ω , $\phi(\mathbf{k}\omega)$ — скалярный потенциал самосогласованного поля.

Теперь использование соотношений (6.80) и (6.81) приводит при замене $\lambda \rightarrow \lambda\phi$ к равенству:

$$1 + \frac{4\pi e^2}{k^2} P \left(\frac{\mathbf{k} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}}}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}} \right) - \frac{4\pi e m}{k^3} \lambda(\mathbf{k}\omega) = 0, \quad (6.128)$$

где символ P означает интеграл в смысле главного значения.

Равенство (6.128) отличается от обычного дисперсионного уравнения последним слагаемым в левой части. Уравнение (6.128) содержит три величины (ω , \mathbf{k} и λ) и поэтому не дает возможности определить закон дисперсии $\omega(\mathbf{k})$. Это и означает справедливость приведенного в условии задачи утверждения: надлежащим выбором λ (т. е. пучка частиц, вводимого в плазму) можно получить любое решение с $\omega = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}$ без затухания.

Задачи для самостоятельного решения

16. Показать более аккуратным вычислением поляризаационного оператора (6.98), что спектр нульзвуковых колебаний в ферми-системе нейтральных частиц лежит выше верхней энергетической границы спектра квазичастичных возбуждений

$$\omega = \frac{kp_F}{m} + \frac{\hbar k^2}{2m}$$

и дается выражением

$$\omega = \left(\frac{kp_F}{m} + \frac{\hbar k^2}{2m} \right) \left\{ 1 + 2 \exp \left[-2 \left(1 + \frac{1}{v(k)q} \right) \right] \right\}.$$

17. Рассмотреть двухкомпонентную электронейтральную в целом вырожденную ферми-систему (например, электронно-дырочный газ в полупроводнике) и показать, что при $\hbar k \leq p_F$ в системе существует ветвь колебаний с акустическим законом дисперсии. Убедиться, что происхождение этой ветви колебаний связано с динамическим экранированием кулоновского взаимодействия тяжелых частиц в системе, что делает ее похожей на ферми-систему частиц, взаимодействующих посредством короткодействующего потенциала.

18. Найти закон дисперсии для плазменных колебаний электронов в размерно-квантованной пленке.

ОПИСАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ ЯВЛЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ УПРАВЛЯЮЩИХ УРАВНЕНИЙ

§ 7.1. Кинетическое уравнение Больцмана

В кинетическом уравнении Больцмана учитываются только столкновения двух частиц друг с другом и пренебрегается влиянием на такое соударение остальных частиц газа:

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{r}_a} + \mathbf{F}_a \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{p}_a} = \left(\frac{\partial f_a}{\partial t} \right)_{\text{ст}}. \quad (7.1)$$

Индекс a указывает сорт частиц газа, \mathbf{F}_a — внешняя сила, действующая на частицы a , $f_a(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$ — одночастичная функция распределения. Интеграл столкновений Больцмана $\left(\frac{\partial f_a}{\partial t} \right)_{\text{ст}}$ в случае упругих соударений частиц записывается в виде

$$\left(\frac{\partial f_a}{\partial t} \right)_{\text{ст}} = \sum_b I_{ab} [f_a, f_b] = \sum_b \int d\mathbf{p}_b d\sigma_{ab} v_{ab} (f'_a f'_b - f_a f_b), \quad (7.2)$$

где $d\sigma_{ab}$ — дифференциальное сечение рассеяния частиц сорта a и b ; v_{ab} — модуль их относительной скорости; f'_a и f'_b — функции распределения частиц a и b , зависящие от импульсов \mathbf{p}'_a и \mathbf{p}'_b после соударения: $f'_a = f_a(\mathbf{p}'_a)$, $f'_b = f_b(\mathbf{p}'_b)$, f_a и f_b — функции импульсов \mathbf{p}_a и \mathbf{p}_b до соударения. Координаты частиц при столкновениях не меняются.

Интеграл столкновений Больцмана применим в случае короткодействующих потенциалов взаимодействия. Для кулоновского потенциала полное сечение рассеяния оказывается расходящимся. При применении уравнения Больцмана к газу заряженных частиц от этой расходимости избавляются путем учета экранирования кулоновского взаимодействия.

Уравнение Больцмана (7.1) — это уравнение баланса. Описываемые им переходы идут с соблюдением микроскопической обратимости и законов сохранения числа частиц, импульса и энергии. Это нелинейное интегродифференциальное уравнение марковского типа.

§ 7.2. Уравнение кинетического баланса Паули

Уравнение Паули, называемое часто уравнением кинетического баланса или *master equation*, имеет вид

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} = \sum_j (P_{ij}w_j - P_{ji}w_i). \quad (7.3)$$

Здесь w_i — вероятность нахождения системы в состоянии, характеризуемом набором квантовых чисел i , P_{ij} — вероятность перехода в единицу времени из состояния j в состояние i : $P_{ij} \geq 0$. Микроскопическая обратимость переходов в замкнутой системе выражается соотношением

$$P_{ij} = P_{ji}. \quad (7.4)$$

Величины w_i могут трактоваться как диагональные элементы редуцированного статистического оператора в представлении, диагонализующем этот оператор:

$$w_i = \langle i | \rho | i \rangle, \quad \text{или} \quad \rho = \sum_i |i\rangle w_i \langle i|.$$

Уравнение Паули сохраняет нормировку распределения вероятностей, обеспечивает монотонный рост энтропии системы и является уравнением релаксационного типа.

§ 7.3. Уравнение Фоккера—Планка

Уравнение Фоккера—Планка используется для статистического описания динамических систем с флуктуирующими параметрами (например, броуновского движения). Рассматривается нелинейная динамическая система, описываемая величиной $\xi(t) = \{\xi_1(t), \dots, \xi_n(t)\}$, удовлетворяющей системе динамических уравнений

$$\dot{\xi}_i(t) = v_i(\xi, t) + f_i(\xi, t). \quad (7.5)$$

Здесь v_i — определенные (заданные) функции, а f_i — случайные функции со свойствами $\langle f_i(\mathbf{r}, t) \rangle = 0$, где угловыми скобками обозначено усреднение по ансамблю реализаций функций f_i . Статистические характеристики $f_i(\xi, t)$ определяются заданием корреляционного тензора

$$B_{ij}(\mathbf{r}t; \mathbf{r}'t') = \langle f_i(\mathbf{r}, t) f_j(\mathbf{r}', t') \rangle. \quad (7.6)$$

В теории, основанной на уравнении Фоккера—Планка, различаются два характерных временных параметра: τ_0 — радиус корреляции случайных сил f_i по временной переменной, и T — время корреляции величин ξ_i . Для большого класса физических систем $T \gg \tau_0$ и существует малый безразмерный параметр $\frac{\tau_0}{T}$, который может быть использован для построения приближенного решения. В простейшем приближении $\tau_0 = 0$, и величина B_{ij} выбирается в виде

$$B_{ij}(\mathbf{r}t; \mathbf{r}'t') = 2\delta(t - t') F_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t). \quad (7.7)$$

Такое приближение называется приближением диффузионного случайного процесса. Оно приводит к уравнению Фоккера—Планка для плотности вероятности $P_t(\mathbf{r})$ реализации решения $\xi(t)$ системы уравнений (7.5):

$$P_t(\mathbf{r}) = \langle \delta(\mathbf{r} - \xi(t)) \rangle, \quad (7.8)$$

где $\xi(t)$ — решение системы (7.5) для какой-либо определенной реализации случайных сил $f_i(\mathbf{r}, t)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P_t(\mathbf{r}) = & - \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \{ [v_k(\mathbf{r}, t) + A_k(\mathbf{r}, t)] P_t(t) \} + \\ & + \sum_{k,l} \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_l} [F_{kl}(\mathbf{r}, \mathbf{r}, t) P_t(t)], \\ \mathbf{r} = \{x_1, \dots, x_n\}, \quad A_k = & \left. \frac{\partial}{\partial x_i} F_{ki}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \right|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}. \end{aligned} \quad (7.9)$$

Уравнение (7.9) решается с начальным условием $P_0(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \xi_0)$ или с условием более общего вида $P_0(\mathbf{r}) = W_0(\mathbf{r})$, где ξ_0 соответствует определенным значениям переменной $\xi(t)$ в начальный момент времени.

Если поле случайных сил стационарно, то F_{kl} и A_k не зависят от времени. Если к тому же f_i однородны и изотропны по всем пространственным координатам, то $F_{kl} = \text{const}$, а $A_k = 0$.

§ 7.4. Кинетические явления в квантовых жидкостях

В пренебрежении возмущениями спиновой плотности кинетическое уравнение для функции распределения $n = \text{Sp } \hat{n}$ квази-частиц квантовой жидкости записывается в виде

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} n \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon - \nabla_{\mathbf{p}} n \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \varepsilon = I(n), \quad (7.10)$$

где ε — энергия квазичастицы, в общем случае являющаяся функционалом функции распределения квазичастиц n , а $I(n)$ — интеграл столкновений квазичастиц.

Уравнение (7.10) применимо в условиях квазиклассичности движения квазичастиц, когда их дебаевская длина волны мала по сравнению с характерной длиной, на которой существенно меняется функция n .

Обычно при решении кинетического уравнения (7.10) используются какие-либо модельные представления о виде квазичастичной энергии.

а). Нормальная Ферми-жидкость. При изучении неравновесных свойств нормальной ферми-жидкости принимается такая же связь между вариациями функции распределения квазичастиц δn и квазичастичной энергии $\delta\varepsilon$, как и в равновесии. Например:

$$\delta\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \varphi(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{p}', \mathbf{r}', t). \quad (7.11)$$

При линеаризации кинетического уравнения по возмущению следует учитывать, что равновесная функция распределения $n_0(\mathbf{p})$ зависит только от квазичастичной энергии $\varepsilon_0(\mathbf{p})$:

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon_0 \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \left(\delta n - \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \delta\varepsilon \right) = I(\delta n). \quad (7.12)$$

Вариация δn отлична от нуля только при значениях импульса, близких к импульсу Ферми p_F . Поэтому в аргументах корреляционной функции $\phi(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ можно положить $|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'| = p_F$.

В результате для изотропной ферми-жидкости корреляционная функция $\phi(\mathbf{p}_F, \mathbf{p}_F')$ зависит только от угла χ между векторами \mathbf{p}_F и \mathbf{p}_F' , и её можно разложить по полиномам Лежандра:

$$A(\chi) = \rho(\varepsilon_F) \varphi(\chi) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) A_l P_l(\cos \chi), \quad (7.13)$$

где $\rho(\varepsilon_F) = \frac{m^* p_F}{\pi^2 \hbar^3}$ — плотность состояний на ферми-поверхности.

Записываем выражение для δn в виде

$$\delta n = \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \nu(\Omega) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t}, \quad (7.14)$$

где Ω — направление, определяемое вектором \mathbf{p}_F , и выбираем направление волнового вектора \mathbf{k} в качестве полярной оси. В высокочастотном приближении ($\omega\tau \gg 1$), когда можно пренебречь

интегралом столкновений в (7.12), получаем следующее уравнение для функции $\nu(\theta, \varphi)$:

$$(s - \cos \theta) \nu(\theta, \varphi) = \cos \theta \int \frac{d\Omega'}{4\pi} A(\chi) \nu(\theta', \varphi'). \quad (7.15)$$

Здесь $u = \frac{\omega}{k}$ — фазовая скорость волны, а $s = \frac{u}{v_F}$.

Решение интегрального уравнения (7.15) проводится с использованием разложения (7.13) для функции $A(x)$, причем коэффициенты A_l выступают в качестве феноменологических параметров. При этом используется теорема сложения для полиномов Лежандра:

$$P_n(\cos \chi) = \sum_{m=-n}^n P_n^m(\cos \theta) P_n^m(\cos \theta') e^{im(\varphi - \varphi')} \frac{(n - |m|)!}{(n + |m|)!}. \quad (7.16)$$

б). Сверхтекучая бозе-жидкость. Полная система уравнений для описания неравновесных свойств сверхтекучей жидкости, кроме кинетического уравнения (7.10), для квазичастиц содержит уравнение непрерывности для плотности системы ρ и уравнение, определяющее зависимость от времени скорости \mathbf{v}_s сверхтекучего движения.

Уравнение непрерывности записывается в обычном виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0. \quad (7.17)$$

Неравновесные свойства сверхтекучей бозе-жидкости в низкочастотном приближении $\omega\tau \ll 1$ хорошо описываются уравнениями двухскоростной гидродинамики, линеаризованные варианты которых записываются в виде

$$\frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} + \nabla p = 0, \quad (7.18)$$

$$\frac{\partial (\rho s)}{\partial t} + \rho s \operatorname{div} \mathbf{v}_n = 0, \quad (7.19)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}_s}{\partial t} + \nabla \mu = 0. \quad (7.20)$$

Здесь p — давление, \mathbf{v}_n — скорость упорядоченного движения квазичастиц, увлекающих часть жидкости, характеризующуюся

нормальной плотностью ρ_n ; $s = \frac{S}{\rho}$ — удельная энтропия. Полный импульс \mathbf{j} единицы объема жидкости выражается соотношением

$$\mathbf{j} = \rho_s \mathbf{v}_s + \rho_n \mathbf{v}_n, \quad (7.21)$$

где $\rho_s = \rho - \rho_n$.

Задачи

1. Покажите, что интеграл столкновений Больцмана обладает свойством

$$\sum_a \int d\mathbf{p}_a (\alpha_0 + \alpha_1 \mathbf{p}_a + \alpha_2 p_a^2) \left(\frac{\partial f_a}{\partial t} \right)_{\text{ст}} = 0, \quad (7.22)$$

где $\alpha_i = \alpha_i(\mathbf{r}, t)$ — произвольные функции \mathbf{r} и t .

Решение. Возьмем интеграл столкновений Больцмана (7.2)

$$\left(\frac{\partial f_a}{\partial t} \right)_{\text{ст}} = \sum_b \int d\mathbf{p}_b d\sigma_{ab} v_{ab} (f'_a f'_b - f_a f_b)$$

и рассмотрим интеграл

$$\begin{aligned} I &= \int d\mathbf{p}_a \varphi(\mathbf{p}_a) \left(\frac{\partial f_a}{\partial t} \right)_{\text{ст}} = \\ &= \sum_b \int d\mathbf{p}_a d\mathbf{p}_b d\sigma_{ab} v_{ab} \varphi(\mathbf{p}_a) (f'_a f'_b - f_a f_b), \end{aligned} \quad (7.23)$$

где $\varphi(\mathbf{p})$ — произвольная функция импульсов. Модуль относительной скорости v_{ab} и сечение рассеяния $d\sigma_{ab}$ одинаковы для прямых и обратных соударений, а фазовый объем при столкновении сохраняется:

$$d\mathbf{p}_a d\mathbf{p}_b = d\mathbf{p}'_a d\mathbf{p}'_b.$$

Чтобы убедиться в справедливости этого соотношения, перейдем к новым переменным: $\mathbf{P} = \frac{(\mathbf{p}_a + \mathbf{p}_b)}{2}$, $\mathbf{p} = \mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b$.

Элементарным вычислением якобиана преобразования убеждаемся в том, что

$$d\mathbf{p}_a d\mathbf{p}_b = d\mathbf{P} d\mathbf{p}.$$

Аналогично можно записать выражение

$$d\mathbf{p}'_a d\mathbf{p}'_b = d\mathbf{P}' d\mathbf{p}',$$

причем $\mathbf{P} = \mathbf{P}'$, так как импульс при столкновениях сохраняется. Таким образом, дело сводится к доказательству соотношения $d\mathbf{p} = d\mathbf{p}'$. Вследствие закона сохранения энергии при упругих соударениях справедливо $|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'|$, и связь между \mathbf{p} и \mathbf{p}' осуществляется обычным преобразованием поворота в пространстве. Отсюда следует, что $d\mathbf{p}' = d\mathbf{p}$.

В силу указанных свойств выражение (7.23) можно переписать в симметризованном виде:

$$I = \frac{1}{4} \sum_b \int d\mathbf{p}_a d\mathbf{p}_b d\sigma_{ab} v_{ab} \left[\varphi(\mathbf{p}_a) + \varphi(\mathbf{p}_b) - \varphi(\mathbf{p}'_a) - \varphi(\mathbf{p}'_b) \right] (f'_a f'_b - f_a f_b). \quad (7.24)$$

Выберем ϕ в виде

$$\phi = \alpha + \alpha_1 p + \alpha_2 p^2. \quad (7.25)$$

Поскольку при соударении двух частиц выполняются законы сохранения импульса и кинетической энергии

$$\mathbf{p}_a + \mathbf{p}_b = \mathbf{p}'_a + \mathbf{p}'_b, \quad \frac{p_a^2}{2m_a} + \frac{p_b^2}{2m_b} = \frac{p'^2_a}{2m_a} + \frac{p'^2_b}{2m_b},$$

то

$$\varphi(\mathbf{p}_a) + \varphi(\mathbf{p}_b) = \varphi(\mathbf{p}'_a) + \varphi(\mathbf{p}'_b).$$

Таким образом, выражение (7.24) при выборе ϕ в виде (7.25) одновременно и симметрично, и антисимметрично по отношению к замене: $\mathbf{p}_a \leftrightarrow \mathbf{p}'_a$, $\mathbf{p}_b \leftrightarrow \mathbf{p}'_b$. Значит, оно равно нулю, что и доказывает соотношение (7.22).

2. Исходя из уравнения Больцмана получите систему уравнений гидродинамики для плотности $\rho(\mathbf{r}, t)$:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_a n_a m_a, \quad n_a(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{p} f_a(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t), \quad (7.26)$$

и гидродинамической скорости $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\rho} \sum_a n_a m_a \langle \mathbf{v}_a \rangle, \quad \langle \mathbf{v}_a \rangle = \frac{1}{n} \int d\mathbf{p} \mathbf{p} v_a f_a(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t). \quad (7.27)$$

Решение. Проинтегрируем уравнение Больцмана (7.1) по импульсу. Учитывая определения (7.26), (7.27) и свойство (7.22) интеграла столкновений Больцмана, получаем

$$\frac{\partial n_a}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} (n_a \langle \mathbf{v}_a \rangle) = 0, \quad (7.28)$$

поскольку $f_a(\mathbf{p}) = 0$ при $|\mathbf{p}| = \infty$. Удобно ввести скорость локального теплового движения $\mathbf{V}_a(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$:

$$\mathbf{V}_a(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \mathbf{v}_a - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t). \quad (7.29)$$

Тогда $\langle \mathbf{V}_a \rangle = \frac{1}{n} \int d\mathbf{p}_a \mathbf{V}_a f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$ и справедливо равенство

$$\sum_a n_a m_a \langle \mathbf{V}_a \rangle = \sum_a n_a m_a \langle \mathbf{v}_a \rangle - \mathbf{u} \sum_a n_a m_a = 0. \quad (7.30)$$

Подставляя в (7.28) соотношение $\langle \mathbf{v}_a \rangle = \mathbf{u} + \langle \mathbf{V}_a \rangle$, переписываем его в виде

$$\frac{\partial n_a}{\partial t} + \operatorname{div}(n_a \mathbf{u} + n_a \langle \mathbf{V}_a \rangle) = 0. \quad (7.31)$$

Умножая (7.31) на m_a и суммируя по сортам частиц, получаем с учетом определений (7.26) и (7.27) и свойства (7.30)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (7.32)$$

Соотношение (7.32) представляет собой уравнение непрерывности гидродинамического потока газа.

Для получения уравнения движения газа умножим кинетическое уравнение (7.1) на $m_a \mathbf{V}_a = m_a(\mathbf{v}_a - \mathbf{u})$, проинтегрируем по импульсам и просуммируем по сортам частиц. Учитывая свойство (7.22), результат можно записать в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \sum_a m_a n_a \langle \mathbf{V}_a \rangle + \frac{\partial}{\partial r_i} \sum_a m_a n_a \langle v_{ai} \mathbf{V}_a \rangle - \\ - \sum_a n_a \left\{ m_a \left\langle \frac{\partial \mathbf{V}_a}{\partial t} \right\rangle + m_a \left\langle v_{ai} \frac{\partial \mathbf{V}_a}{\partial r_i} \right\rangle + \mathbf{F}_a \right\} = 0. \end{aligned} \quad (7.33)$$

Рассмотрим отдельные слагаемые в соотношении (7.33). Вводим тензор давлений $P_{ik}(\mathbf{r}, t)$:

$$P_{ik}(\mathbf{r}, t) = \sum_a m_a n_a \langle V_{ai} V_{ak} \rangle. \quad (7.34)$$

В силу свойства (7.30) это выражение можно записать в виде

$$P_{ik}(\mathbf{r}, t) = \sum_a m_a n_a \langle v_{ai} V_{ak} \rangle.$$

Далее, используя (7.29), находим

$$\sum_a m_a n_a \left\langle \frac{\partial \mathbf{V}_a}{\partial t} \right\rangle = - \sum_a m_a n_a \frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}. \quad (7.35)$$

Наконец, снова учитывая (7.29), имеем

$$\sum_a m_a n_a \left\langle v_{ai} \frac{\partial \mathbf{V}_a}{\partial r_i} \right\rangle = -\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial r_i} \sum_a m_a n_a \langle v_{ai} \rangle = -\rho u_i \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial r_i}. \quad (7.36)$$

Подставляя соотношения (7.34)–(7.36) в (7.33) и учитывая свойство (7.30), получаем уравнение движения газа в гидродинамическом приближении:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \left(\mathbf{u} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) u_i = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P_{ik}}{\partial r_k} + \frac{1}{\rho} \sum_a n_a F_{ai}.$$

3. Используя кинетическое уравнение Больцмана, получите уравнение баланса энергии, вводя локальную температуру $T(\mathbf{r}t)$ с помощью равенства

$$\frac{3}{2} nkT = \frac{1}{2} \sum_a m_a n_a \langle V_a^2 \rangle, \quad (7.37)$$

где \mathbf{V}_a определяется формулой (7.29), а $n = \sum_a n_a$.

Решение. Умножим кинетическое уравнение (7.1) на $\frac{m_a \mathbf{V}_a^2}{2}$, проинтегрируем по импульсам и просуммируем по всем сортам частиц. Учитывая свойство (7.22) интеграла столкновений Больцмана, запишем результат в виде

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{2} \sum_a n_a m_a \langle V_a^2 \rangle + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \frac{1}{2} \sum_a n_a m_a \langle \mathbf{v}_a V_a^2 \rangle - \\ & - \frac{1}{2} \sum_a n_a m_a \left\{ \left\langle \frac{\partial V_a^2}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \mathbf{v}_a \frac{\partial V_a^2}{\partial \mathbf{r}} \right\rangle + \mathbf{F}_a \left\langle \frac{\partial V_a^2}{\partial \mathbf{p}_a} \right\rangle \right\} = 0. \end{aligned} \quad (7.38)$$

Преобразуем отдельные слагаемые в (7.26). Вводим тепловой поток \mathbf{q} относительно гидродинамического течения:

$$\mathbf{q} = \sum_a \mathbf{q}_a = \frac{1}{2} \sum_a n_a m_a \langle V_a^2 \mathbf{V}_a \rangle, \quad (7.39)$$

где

$$\langle V_a^2 \mathbf{V}_a \rangle = \frac{1}{n} \int_a d\mathbf{p} V_a^2 \mathbf{V}_a f_a(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t).$$

Тогда в силу (7.37) и (7.39) имеем

$$\frac{1}{2} \sum_a n_a m_a \langle \mathbf{v}_a V_a^2 \rangle = \frac{1}{2} \sum_a n_a m_a \langle (\mathbf{u} + \mathbf{V}_a) V_a^2 \rangle = \mathbf{q} + \mathbf{u} \cdot \frac{3}{2} nkT. \quad (7.40)$$

Далее с учетом (7.29) и (7.30) имеем

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \sum_a n_a m_a \left\langle \frac{\partial V_a^2}{\partial t} \right\rangle &= \sum_a n_a m_a \left\langle \mathbf{V}_a \frac{\partial \mathbf{V}_a}{\partial t} \right\rangle = \\ &= -\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \sum_a n_a m_a \langle \mathbf{V}_a \rangle = 0. \end{aligned} \quad (7.41)$$

Аналогично, учитывая (7.22) для тензора давлений, найдем

$$\frac{1}{2} \sum_a n_a m_a \left\langle \mathbf{v}_a \frac{\partial V_a^2}{\partial \mathbf{r}} \right\rangle = -\frac{\partial u_i}{\partial r_k} \sum_a n_a m_a \langle v_{ak} V_{ai} \rangle = -\frac{\partial u_i}{\partial r_k} P_{ik}. \quad (7.42)$$

И наконец, вследствие (7.29) и соотношения $p_a = m_a \mathbf{v}_a$, имеем

$$\frac{1}{2} \sum_a n_a m_a \mathbf{F}_a \left\langle \frac{\partial V_a^2}{\partial \mathbf{p}} \right\rangle = \sum_a n_a \mathbf{F}_a \langle \mathbf{V}_a \rangle. \quad (7.43)$$

Подставляя соотношения (7.40)–(7.43) в (7.38) и учитывая определение (7.37), получаем уравнение баланса энергии в гидродинамическом приближении:

$$\frac{\partial}{\partial t} \cdot \frac{3}{2} n \kappa T + \operatorname{div} \left\{ \mathbf{q} + \mathbf{u} \cdot \frac{3}{2} n \kappa T \right\} + \frac{\partial u_i}{\partial r_i} P_{ik} - \sum_a n_a \mathbf{F}_a \langle \mathbf{V}_a \rangle = 0. \quad (7.44)$$

Учитывая, что вследствие (7.28) и (7.29) справедливо

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\operatorname{div} \left(n \mathbf{u} + \sum_a n_a \langle \mathbf{V}_a \rangle \right),$$

можно переписать уравнение (7.44) в виде

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} n k \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} \right) &= -\operatorname{div} \mathbf{q} - \frac{\partial u_i}{\partial r_k} P_{ik} + \\ &+ \sum_a n_a \mathbf{F}_a \langle V_a \rangle + \frac{3}{2} \kappa T \operatorname{div} \left(\sum_a n_a \langle \mathbf{V}_a \rangle \right). \end{aligned}$$

4. Покажите, что кинетическое уравнение Больцмана приводит к возрастанию плотности энтропии системы

$$S = - \sum_a \int d\mathbf{p} f_a \ln f_a \quad (7.45)$$

при любом неравновесном начальном распределении.

Решение. Запишем уравнение Больцмана в виде (7.45):

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}_a \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{p}} = \left(\frac{\partial f_a}{\partial t} \right)_{\text{ст}}. \quad (7.46)$$

Вычислим производную по времени от выражения

$$\frac{\partial S}{\partial t} = - \sum_a \int d\mathbf{p} (1 + \ln f_a) \frac{\partial f_a}{\partial t}.$$

Подставляя сюда выражение для $\frac{\partial f_a}{\partial t}$ из (7.46), получаем

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \sum_a \int d\mathbf{p} (1 + \ln f_a) \left[\mathbf{v} \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}_a \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{p}} - \left(\frac{\partial f_a}{\partial t} \right)_{\text{ст}} \right]. \quad (7.47)$$

Рассмотрим отдельные слагаемые в правой части этого соотношения. Непосредственной проверкой легко убедиться в справедливости равенств

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{p} (1 + \ln f_a) \mathbf{v} \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{r}} &= \int d\mathbf{p} \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} (f_a \ln f_a), \\ \mathbf{F}_a \int d\mathbf{p} (1 + \ln f_a) \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{p}} &= \mathbf{F}_a \int d\mathbf{p} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} (f_a \ln f_a) = 0, \end{aligned} \quad (7.48)$$

так как $f_a = 0$ при $|\mathbf{p}| = \infty$. Как мы видели ранее, интеграл столкновений Больцмана обладает свойством

$$\int d\mathbf{p} \left(\frac{\partial f_a}{\partial t} \right)_{\text{ст}} = 0. \quad (7.49)$$

Вводим величину $\Delta\sigma$, называемую производством энтропии:

$$\Delta\sigma = - \sum_a \int d\mathbf{p} \ln f_a \left(\frac{\partial f_a}{\partial t} \right)_{\text{ст}}. \quad (7.50)$$

С учетом соотношений (7.48)–(7.50) выражение (7.47) для $\frac{\partial S}{\partial t}$ переписывается следующим образом:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \text{div} \sum_a d\mathbf{p} \mathbf{v}_a f_a \ln f_a + \Delta\sigma. \quad (7.51)$$

Первое слагаемое в правой части этого выражения представляет собой плотность потока энтропии \mathbf{T} :

$$\mathbf{T} = - \sum_a \int d\mathbf{p} \mathbf{v}_a f_a \ln f_a. \quad (7.52)$$

Теперь соотношение (7.51) переписывается в виде

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{T} = \Delta \sigma. \quad (7.53)$$

Уравнение (7.53) представляет собой уравнение баланса энтропии. При равной нулю правой части соотношение (7.53) имеет форму закона сохранения. Нетрудно показать, что производство энтропии $\Delta \sigma \geq 0$ для интеграла столкновений Больцмана

$$\left(\frac{\partial f_a}{\partial t} \right)_{\text{ст}} = \sum_b \int d\mathbf{p}_b d\sigma_{ab} v_{ab} (f'_a f'_b - f_a f_b).$$

Действительно, для $\Delta \sigma$ имеем

$$\Delta \sigma = - \sum_{ab} \int d\mathbf{p}_a d\mathbf{p}_b d\sigma_{ab} (f'_a f'_b - f_a f_b) \ln f_a.$$

Это выражение можно переписать в симметричном виде по отношению к сортам частиц a и b и импульсам частиц до соударения (нештрихованным) и после соударения (штрихованным) вследствие одинаковости относительной скорости v_{ab} и сечения рассеяния $d\sigma_{ab}$ для прямых и обратных соударений и равенства $d\mathbf{p}_a d\mathbf{p}_b = d\mathbf{p}'_a d\mathbf{p}'_b$:

$$\Delta \sigma = \frac{1}{4} \sum_{ab} \int d\mathbf{p}_a d\mathbf{p}_b d\sigma_{ab} v_{ab} (f'_a f'_b - f_a f_b) \ln \frac{f'_a f'_b}{f_a f_b}.$$

Знак правой части этого выражения определяется знаком функции

$$(x - y) \ln \frac{x}{y} \geq 0,$$

причем знак равенства достигается при $x = y$. Итак,

$$\Delta \sigma \geq 0, \quad (7.54)$$

и из соотношения (7.53) с учетом (7.54) следует, что

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{T} \geq 0.$$

Наконец, для пространственно однородной системы $\operatorname{div} \mathbf{T} = 0$ и, следовательно, справедливо неравенство

$$\frac{\partial S}{\partial t} \geq 0.$$

5. Покажите, что уравнение кинетического баланса Паули (7.3) сохраняет нормировку вероятности

$$\sum_i w_i = 1. \quad (7.55)$$

Решение. Рассмотрим производную по времени от выражения от суммы вероятностей (7.55):

$$\frac{d}{dt} \sum_i w_i = \sum_i \frac{\partial w_i}{\partial t}.$$

Подставляя сюда производную $\frac{dw_i}{dt}$ из уравнения Паули, получаем

$$\frac{d}{dt} \sum_i w_i = \sum_{ij} (P_{ij} w_j - P_{ji} w_i) = 0$$

вследствие свойства $P_{ij} = P_{ji}$. Поэтому $\sum_i w_i = \text{const}$, и при выполнении условия нормировки (7.55) в начальный момент времени оно остается справедливым и в последующие времена.

6. Показать, что уравнение Паули (7.3) приводит к возрастанию энтропии замкнутой системы при любом неравновесном начальном распределении.

Решение. Энтропия системы

$$S = - \langle \ln w_i \rangle = - \sum_i w_i \ln w_i.$$

Вычислим производную по времени от S :

$$\frac{dS}{dt} = - \frac{d}{dt} \sum_i w_i \ln w_i = - \sum_i (1 + \ln w_i) \frac{\partial w_i}{\partial t}. \quad (7.56)$$

В силу сохранения условия нормировки (7.55) $\sum_i \frac{\partial w_i}{\partial t} = 0$. Поэтому, используя (7.56) и уравнение Паули, имеем

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= - \sum_i \ln w_i \frac{\partial w_i}{\partial t} = - \sum_{ij} (P_{ij} w_j - P_{ji} w_i) \ln w_i = \\ &= \sum_{ij} P_{ij} (w_i - w_j) \ln w_i. \end{aligned}$$

Симметризуем это выражение по индексам i и j :

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= \frac{1}{2} \sum_{ij} P_{ij} ((w_i - w_j) \ln w_i + (w_j - w_i) \ln w_j) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ij} P_{ij} (w_i - w_j) \ln \frac{w_i}{w_j}. \end{aligned}$$

Полученное выражение неотрицательно, поэтому $\frac{\partial S}{\partial t} \geq 0$. Знак равенства имеет место при $w_i = w_j$ для любых i и j . Этот случай соответствует равновесному состоянию в микроканоническом ансамбле, описывающем замкнутую систему. Итак, при любом начальном неравновесном распределении, когда $w_i \neq w_j$, имеем

$$\frac{\partial S}{\partial t} > 0.$$

7. Показать, что при любом начальном распределении вероятностей $w_i(0)$ уравнение Паули (7.3) является уравнением релаксационного типа.

Решение. Введем вектор состояния W с компонентами w_i и запишем уравнение Паули в матричном виде

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \Lambda W, \quad (7.57)$$

где Λ — матрица перехода с элементами

$$\Lambda_{ij} = P_{ij} - \delta_{ij} \sum_k P_{ik}. \quad (7.58)$$

Из вещественности вероятностей переходов P_{ij} и микроскопической обратимости следует, что матрица Λ эрмитова:

$$\Lambda^+ = \Lambda.$$

Это свойство позволяет утверждать, что собственные значения матрицы Λ вещественны, а собственные векторы ортогональны:

$$\Lambda \Phi_n = \Lambda_n \Phi_n, \quad \Lambda_n^* = \Lambda_n,$$

где Φ_n — вектор с компонентами $\Phi_k^{(n)}$. Записав формальное решение уравнения (7.57) в виде

$$W(t) = e^{i\Lambda} W(0),$$

где $W(0)$ — начальный вектор состояния, можно разложить $W(0)$ по собственным векторам матрицы Λ :

$$W(0) = \sum_n C_n \Phi_n, \text{ или } w_k(0) = \sum_n c_n \Phi_k^{(n)}.$$

Теперь вектор $W(t)$ можно представить следующим образом:

$$W(t) = \sum_n C_n \Phi_n e^{t\Lambda_n}, \text{ или } w_k(t) = \sum_n c_n \Phi_k^{(n)} e^{t\Lambda_n}. \quad (7.59)$$

Покажем, что все $\Lambda_n < 0$ и $\Lambda_0 = 0$. Для собственных функций Φ_n и спектра Λ_n справедливы равенства

$$(\Phi_n, \Phi_m) = \delta_{nm}, \quad \Lambda_n = (\Phi_n, \Lambda \Phi_n),$$

где символом (A, B) обозначено скалярное произведение A и B :

$$(A, B) = \sum_i A_i^* B_i.$$

Найдем знак выражения $(\Phi, \Lambda \Phi)$, где Φ — произвольный вектор: $\Phi = \{\Phi_i\}$. Имеем

$$\begin{aligned} (\Phi, \Lambda \Phi) &= \sum_{ij} \Phi_i^* (P_{ij} \Phi_j - P_{ji} \Phi_i) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ij} P_{ij} (\Phi_i^* (\Phi_j - \Phi_i) + \Phi_j^* (\Phi_i - \Phi_j)) = \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{ij} P_{ij} |\Phi_i - \Phi_j|^2 \leq 0. \end{aligned} \quad (7.60)$$

Знак равенства имеет место при $\Phi_i = \Phi_j$. Этот случай соответствует собственному значению $\Lambda_0 = 0$ и собственному вектору Φ_0 . Все Λ_n при $n \neq 0$ в силу (7.60) отрицательны. Теперь имеем вместо (7.59) выражение

$$W(t) = C_0 \Phi_0 + \sum_{n \neq 0} C_n \Phi_n e^{-\frac{t}{|t_n|}}, \quad (7.61)$$

где $t_n = \Lambda_n^{-1}$ — спектр времен релаксации системы. Видно, что с течением времени система необратимо релаксирует к не зависящему от времени равновесному состоянию:

$$W(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} C_0 \Phi_0.$$

8. Решите уравнение кинетического баланса Паули (7.3) для двухуровневой системы с начальным условием $w_1(0) = 1$, $w_2(0) = 0$.

Решение. Обозначим вероятность перехода через $P_{12} = P_{21} = p$. Матрица перехода Λ в рассматриваемом случае с учетом соотношения (7.58) записывается в виде

$$\Lambda = \begin{pmatrix} p & p \\ p & -p \end{pmatrix}.$$

Для нахождения собственных значений матрицы Λ приравняем нулю определитель:

$$\begin{vmatrix} -p - \lambda & p \\ p & -p - \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

раскрывая который находим $\Lambda_0 = 0$, $\Lambda_1 = -2p$.

Нормированный собственный вектор Φ_0 матрицы Λ , принадлежащий собственному значению $\Lambda_0 = 0$, есть

$$\Phi_0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix},$$

а собственный вектор Φ_1 , принадлежащий значению $\Lambda_1 = -2p$, равен

$$\Phi_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

Начальный вектор $W(0)$ распределения вероятностей по условию равен

$$W(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Раскладывая вектор W по собственным векторам матрицы перехода Λ

$$W(0) = C_0\Phi_0 + C_1\Phi_1,$$

находим $C_0 = C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

Итак, в соответствии с формулой (7.61), вероятность заполнения состояний в произвольный момент времени t определяется выражением

$$W(t) = C_0\Phi_0 + C_1\Phi_1 e^{t\Lambda_1},$$

или

$$w_1(t) = \frac{1}{2}(1 + e^{-2pt}), \quad w_2(t) = \frac{1}{2}(1 - e^{-2pt}).$$

Видно, что предельные значения вероятностей при $t \rightarrow \infty$ одинаковы:

$$\omega_1(\infty) = \omega_2(\infty) = \frac{1}{2}.$$

9. Решите уравнение кинетического баланса Паули (7.3) для n -уровневой системы с начальным распределением вероятностей $w_1(0) = 1$, $w_k(0) = 0$ ($k = 2, 3, \dots, n$), считая для простоты, что все вероятности переходов между различными состояниями одинаковы: $P_{ij} = p$. Считать, что $n \gg 1$, однако произведение np конечно.

Решение. Матрица перехода Λ в соответствии с (7.58) имеет вид

$$\Lambda = \begin{pmatrix} -(n-1)p & p & p & \dots & p \\ p & -(n-1)p & p & \dots & p \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ p & p & p & \dots & -(n-1)p \end{pmatrix}.$$

Симметрия матрицы позволяет легко найти ее собственные значения:

$$\Lambda_0 = 0, \quad \Lambda_k = -np, \quad k = 1, 2, \dots, n-1.$$

Таким образом, есть одно невырожденное собственное значение $\Lambda_0 = 0$ и $(n-1)$ -кратно вырожденное собственное значение $\Lambda_1 = -np$. Нормированный собственный вектор Φ_0 есть

$$\Phi_0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{n}} \\ \frac{1}{\sqrt{n}} \\ \frac{1}{\sqrt{n}} \\ \dots \\ \frac{1}{\sqrt{n}} \end{pmatrix}.$$

Собственные векторы, соответствующие $(n-1)$ -кратно вырожденному собственному значению $\Lambda_1 = -np$, можно записать в виде

$$\Phi_1 = \begin{pmatrix} [n(n-1)]^{-\frac{1}{2}} \\ - \left[\frac{(n-1)}{n} \right]^{\frac{1}{2}} \\ [n(n-1)]^{-\frac{1}{2}} \\ \dots \\ [n(n-1)]^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \quad \Phi_2 = \begin{pmatrix} [n(n-1)]^{-\frac{1}{2}} \\ [n(n-1)]^{-\frac{1}{2}} \\ - \left[\frac{(n-1)}{n} \right]^{\frac{1}{2}} \\ \dots \\ [n(n-1)]^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \dots,$$

$$\Phi_{n-1} = \begin{pmatrix} [n(n-1)]^{-\frac{1}{2}} \\ [n(n-1)]^{-\frac{1}{2}} \\ \dots \\ - \left[\frac{(n-1)}{n} \right]^{\frac{1}{2}} \end{pmatrix}.$$

Эти векторы нормированы на единицу, ортогональны вектору Φ_0 и ортогональны друг другу с точностью до членов порядка $\frac{1}{\sqrt{n}}$. В соответствии с формулой (7.59), учитывая вырождение Λ_i ($i \neq 0$), можно записать выражения для $w(t)$ в виде

$$w_1(t) = C_0 \frac{1}{\sqrt{n}} + C_1 \frac{n-1}{\sqrt{n(n-1)}} e^{-npt},$$

$$w_k(t) = C_0 \frac{1}{\sqrt{n}} + C_1 \left[\frac{n-2}{\sqrt{n(n-1)}} - \sqrt{\frac{n-1}{n}} \right] e^{-npt},$$

$$k = 2, 3, \dots, n$$

или, вычисляя выражение в квадратных скобках,

$$w_k(t) = C_0 \frac{1}{\sqrt{n}} - C_1 \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} e^{-npt}, \quad k = 2, 3, \dots, n.$$

Коэффициенты C_0 и C_1 находятся из начальных условий

$$\frac{C_0}{\sqrt{n}} + \frac{C_1(n-1)}{\sqrt{n(n-1)}} = 1, \quad \frac{C_0}{\sqrt{n}} - \frac{C_1}{\sqrt{n(n-1)}} = 0.$$

Решая эту систему, находим

$$C_0 = \frac{1}{\sqrt{n}}, \quad C_1 = \sqrt{\frac{n-1}{n}}.$$

Итак,

$$w_1(t) = \frac{1}{n} [1 + (n-1)e^{-npt}], \quad w_k(t) = \frac{1}{n} (1 - e^{-npt}), \quad (7.62)$$

$$k = 2, 3, \dots, n.$$

При $n \gg 1$ отсюда находим

$$w_1(t) = \frac{1}{n} + e^{-npt}, \quad w_k(t) = \frac{1}{n} (1 - e^{-npt}), \quad k = 2, 3, \dots, n.$$

Эту задачу можно, разумеется, решить, непосредственно обращаясь к уравнению (7.3). Поскольку все w_i равны w_j при $i, j \neq 1$, то это уравнение преобразуется к виду

$$\dot{w}_1(t) = p(n-1)(w_k - w_1), \quad \dot{w}_k(t) = p(w_1 - w_k), \quad (7.63) \\ k = 2, 3, \dots, n.$$

Ищем решение в форме

$$w_1(t) = C_1 e^{\alpha t}, \quad w_k(t) = C_2 e^{\alpha t}, \quad k = 2, 3, \dots, n.$$

Подстановка этих выражений в уравнения (7.63) приводит к следующему условию существования нетривиальных решений:

$$\begin{vmatrix} \alpha + p(n-1) & -p(n-1) \\ -p & \alpha + p \end{vmatrix} = 0,$$

откуда $\alpha_1 = 0$, $\alpha_2 = -np$. Найденные значения α позволяют записать выражения для вероятностей $w(t)$ в виде

$$w_1(t) = B_1 + B_2 e^{-npt}, \quad w_k(t) = B_1 - \frac{B_2}{n-1} e^{-npt}. \quad (7.64)$$

Использование начальных условий дает следующие значения B_1 и B_2 :

$$B_1 = \frac{1}{n}, \quad B_2 = 1 - \frac{1}{n},$$

и выражения (7.64) совпадают с (7.62).

10. Записать уравнение Фоккера—Планка для маятника с одной степенью свободы, помещенного в термостат, состоящий из молекул газа, непрерывно бомбардирующих маятник.

Решение. Уравнение движения маятника имеет вид

$$J\ddot{\varphi} + \kappa\dot{\varphi} + mgl \sin \varphi = N + N_1(t), \quad (7.65)$$

где J — момент инерции, m — масса маятника, l — расстояние от точки подвеса до центра масс. Угол φ характеризует отклонение маятника от вертикали, κ описывает сопротивление движению маятника, пропорциональное скорости, N и $N_1(t)$ — соответственно заданный момент внешних сил и момент случайных сил, действующих со стороны молекул.

Корреляционная функция случайных сил аналогично (7.7) записывается следующим образом:

$$\langle N_1(t) N(t') \rangle = \frac{2JkT}{\tau} \delta(t - t'). \quad (7.66)$$

Вводим обозначения

$$\omega^2 = \frac{mgl}{J}, \quad \frac{1}{\tau} = \frac{\kappa}{J}.$$

Теперь уравнение (7.65) переписывается в виде

$$\ddot{\varphi} + \frac{1}{\tau} \dot{\varphi} + \omega^2 \sin \varphi = \frac{1}{J} (N + N_1(t)). \quad (7.67)$$

Перейдем от (7.67) к системе уравнений первого порядка. Вводим момент импульса L как производную от кинетической энергии по угловой скорости движения $\dot{\varphi}$:

$$L = \frac{\partial E_k}{\partial \dot{\varphi}} = J\dot{\varphi}.$$

Теперь вместо (7.67) имеем

$$\dot{\varphi} = \frac{L}{J}, \quad \dot{L} = -\frac{L}{\tau} - J\omega^2 \cos \varphi + N + N_1(t). \quad (7.68)$$

Если ввести функцию Гамильтона

$$H = E_k + E_{\text{п}} = \frac{L^2}{2J} - mgl \cos \varphi - N\varphi, \quad (7.69)$$

то системе уравнений (7.68) можно придать вид системы уравнений Гамильтона:

$$\dot{\varphi} = \frac{\partial H}{\partial L}, \quad \dot{L} = -\frac{\partial H}{\partial \varphi} - \frac{L}{\tau} + N_1(t). \quad (7.70)$$

Соответствующее системе (7.70) уравнение Фоккера—Планка, согласно (7.69), записывается в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P_t(L, \varphi) + \frac{L}{J} \frac{\partial}{\partial \varphi} P_t(L, \varphi) - \frac{\partial H}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial L} P_t(L, \varphi) - \\ - \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial L} (L P_t(L, \varphi)) = \frac{JkT}{\tau} \frac{\partial^2}{\partial L^2} P_t(L, \varphi). \end{aligned} \quad (7.71)$$

11. Рассмотрите броуновское движение маятника, описываемое уравнением (7.71), в отсутствие внешних сил ($E_{\text{п}} = \text{const}$). Считать, что в начальный момент имеется равномерное распределение по углу φ : $P_0(L, \varphi) = P_0(L)$.

Решение. Уравнение Фоккера—Планка (7.71) в рассматриваемом случае принимает вид

$$\frac{\partial P_t}{\partial t} + \frac{L}{J} \frac{\partial P_t}{\partial \varphi} - \frac{1}{\tau} P_t - \frac{L}{\tau} \frac{\partial P_t}{\partial L} = \frac{JkT}{\tau} \frac{\partial^2 P_t}{\partial L^2}. \quad (7.72)$$

Из уравнения (7.72) видно, что равномерное распределение по углу ϕ сохранится и во все последующие времена: $P_t(L, \phi) = P_t(L)$. Теперь имеем вместо (7.72)

$$\frac{\partial P_t}{\partial t} - \frac{1}{\tau} P_t - \frac{L}{\tau} \frac{\partial P_t}{\partial L} = \frac{JkT}{\tau} \frac{\partial^2 P_t}{\partial L^2}. \quad (7.73)$$

Тепловое движение молекул в конце концов приведет к установлению максвелловского распределения по скоростям. Поэтому ищем решение уравнения (7.73) в виде

$$P_t(L) = \frac{\alpha(t)}{\sqrt{\pi}} \exp(-\alpha^2(t) L^2). \quad (7.74)$$

Предэкспоненциальный множитель в (7.74) выбран таким образом, чтобы в любой момент времени было выполнено условие нормировки плотности вероятности $P_t(L)$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dL P_t(L) = \frac{\alpha(t)}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dL \exp(-\alpha^2(t) L^2) = 1.$$

Подставляя выражение (7.74) для $P_t(L)$ в (7.73), получаем уравнение для $\alpha(t)$:

$$\dot{\alpha} - \frac{1}{\tau} + \frac{2JkT}{\tau} \alpha^2 = 0. \quad (7.75)$$

Стационарное ($\dot{\alpha} = 0$) решение уравнения (7.75) $\alpha(\infty) = \frac{1}{\sqrt{2\pi JkT}}$ дает равновесное максвелловское распределение по моменту импульса L :

$$P_{\infty}(L) = \frac{1}{\sqrt{2JkT}} \exp\left(-\frac{L^2}{2JkT}\right). \quad (7.76)$$

Нестационарное решение уравнения (7.75) следует искать с учетом вида начального распределения $P_0(L)$. Если, например, $P_0(L) = \delta(L)$, то уравнение (7.75), как видно из (7.74), нужно решить с начальным условием $\alpha^{-1}(t) = 0$ при $t = 0$. Такое решение имеет вид

$$\frac{1}{\alpha^2(t)} = 2JkT \left(1 - e^{-\frac{2t}{\tau}}\right). \quad (7.77)$$

Действительно, переписав уравнение (7.75) в виде

$$\frac{\dot{\alpha}}{\alpha^3} - \frac{1}{\tau\alpha^2} + \frac{2JkT}{\tau} = 0,$$

убеждаемся, что оно эквивалентно уравнению

$$\frac{1}{2}\dot{\psi} + \frac{1}{\tau}\psi + \frac{2JkT}{\tau} = 0, \quad (7.78)$$

где $\psi = -\frac{1}{\alpha^2}$, причем $\psi(0) = 0$. Уравнение (7.78) легко решается; в результате приходим к выражению (7.77). При подстановке выражения (7.77) в (7.73) получившееся решение описывает установление максвелловского распределения. Характерное время установления такого распределения составляет $\frac{\tau}{2}$.

12. Рассмотрите броуновское движение маятника, описываемое уравнением (7.71), считая, что при $t = 0$ имеется равновесное максвелловское распределение по моменту импульса L , но неравновесное распределение по углу ϕ : $P_0(L, \phi) = P_\infty(L)\delta(\phi)$. Внешние силы отсутствуют.

Решение. В рассматриваемом случае уравнение Фоккера—Планка имеет вид (7.72). Ищем его решение в виде

$$P_t(L, \varphi) = P_\infty(L) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \beta(t) \exp \left\{ -\beta^2(t) \left[\varphi - \frac{L}{J} \tau \gamma(t) \right]^2 \right\}. \quad (7.79)$$

Такое выражение выбирается для выполнения условия сохранения нормировки плотности вероятности $P_t(L, \phi)$ в любой момент времени, так как для входящего в (7.79) множителя, зависящего от ϕ , справедливо равенство

$$\frac{\beta(t)}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi \exp \left\{ -\beta^2(t) \left[\varphi - \frac{L}{J} \tau \gamma(t) \right]^2 \right\} = 1.$$

Выражение в квадратных скобках в показателе экспоненты соответствует тепловому размытию δ -образного начального распределения по углу за счет движения молекул термостата. Очевидно, что при $t = 0$ должно быть выполнено условие $\gamma(0) = 0$, $\frac{1}{\beta(0)} = 0$.

Подставляем (7.79) в уравнение (7.71). После несложных алгебраических преобразований получим

$$\left(\frac{\dot{\beta}}{\beta} + \frac{2\tau kT}{J}\beta^2\gamma^2\right) \left[1 - 2\beta^2\left(\varphi - \frac{L}{J}\tau\gamma\right)^2\right] + 2\beta^2\frac{L}{J}\left(\varphi - \frac{L}{J}\tau\gamma\right)(\tau\dot{\gamma} + \gamma - 1) = 0.$$

Отсюда следует, что β и γ удовлетворяют уравнениям

$$\frac{\dot{\beta}}{\beta^3} = -\frac{2\tau kT}{J}\gamma^2, \quad (7.80)$$

$$\dot{\gamma} + \frac{\gamma}{\tau} = \frac{1}{\tau}. \quad (7.81)$$

Соответствующее начальному условию $\gamma(0) = 0$ решение уравнения (7.81) записывается в виде

$$\gamma(t) = 1 - e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (7.82)$$

Подставляя (7.82) в (7.80) и выполняя интегрирование по t от нуля до t , получаем при учете начального условия $\frac{1}{\beta} = 0$

$$\frac{1}{\beta^2(t)} = \frac{4\tau kT}{J} \left[t - \frac{\tau}{2} \left(3 - 4e^{-\frac{t}{\tau}} + e^{-\frac{2t}{\tau}} \right) \right]. \quad (7.83)$$

С помощью выражения (7.79) можно найти среднее значение квадрата угла поворота маятника из положения $\phi = 0$, существовавшего при $t = 0$, к моменту времени t :

$$\langle \varphi^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dLP_{\infty}(L) \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi \frac{\beta(t)}{\sqrt{\pi}} \exp \left\{ -\beta^2(t) \left[\varphi - \frac{L}{J}\tau\gamma(t) \right]^2 \right\} \varphi^2.$$

Интеграл по ϕ вычисляется после замены переменной $\varphi' = \varphi - \frac{L}{J}\tau\gamma(t)$. После этого легко вычисляется интеграл по L . В результате, подставляя выражение (7.82) для $\gamma(t)$, имеем

$$\langle \varphi^2 \rangle = \frac{2\tau kT}{J} \left[t - \tau \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau}} \right) \right]. \quad (7.84)$$

При малых временах t , когда $t \ll \tau$, поведение системы имеет динамический характер. Действительно, в этом случае из (7.84), раскладывая экспоненту в ряд Тейлора и ограничиваясь квадратичными по t членами, имеем

$$\langle \varphi^2 \rangle = \frac{kT}{J} t^2.$$

При больших временах, когда $t \gg \tau$, средний квадрат углового смещения пропорционален первой степени времени, что характерно для случайных блужданий.

13. Рассмотрите броуновское движение маятника, описываемое уравнением (7.72), считая, что начальное распределение плотности вероятности имеет вид

$$P_0(L, \phi) = \delta(L)\delta(\phi), \quad (7.85)$$

что соответствует неподвижным, вертикально расположенным маятникам.

Решение. Будем искать решение уравнения Фоккера—Планка (7.72) в виде

$$P_t(L, \varphi) = \frac{1}{\pi} \alpha(t) e^{-\alpha^2(t)L^2} \beta(t) \exp \left\{ -\beta^2(t) \left[\varphi - \frac{L}{J} \tau \gamma(t) \right]^2 \right\}, \quad (7.86)$$

причем вследствие начального условия (7.85) при $t = 0$ должны обращаться в нуль $\frac{1}{\alpha(0)}$, $\frac{1}{\beta(0)}$ и $\gamma(0)$. Подставляя выражение (7.86) в (7.72), получаем после несложных алгебраических преобразований

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\dot{\alpha}}{\alpha} - \frac{1}{\tau} (1 - 2JkT\alpha^2) \right] (1 - 2\alpha^2 L^2) + \\ & + \left(\frac{\dot{\beta}}{\beta} + \frac{2\tau kT}{J} \beta^2 \gamma^2 \right) \left[1 - 2\beta^2 \left(\varphi - \frac{L}{J} \tau \gamma \right) \right] + \\ & + 2\beta^2 \frac{L}{J} \left(\varphi - \frac{L}{J} \tau \gamma \right) [\tau \dot{\gamma} - (1 - 4\alpha^2 JkT) \gamma - 1] = 0. \end{aligned}$$

Отсюда следуют уравнения для функций α , β и γ

$$\frac{\dot{\alpha}}{\alpha} - \frac{1}{\tau} + \frac{2JkT}{\tau} \alpha^2 = 0, \quad (7.87)$$

$$\frac{\dot{\beta}}{\beta} + \frac{2\tau kT}{J} \beta^2 \gamma^2 = 0, \quad (7.88)$$

$$\tau \dot{\gamma} + (4JkT\alpha^2 - 1) \gamma - 1 = 0. \quad (7.89)$$

Уравнение (7.87) совпадает с уравнением (7.75). Его решение, соответствующее начальному условию (7.85), имеет вид (7.77). Таким образом, и в этом случае за время $\frac{\tau}{2}$ происходит установление равновесного максвелловского распределения по моменту импульса. Это распределение устанавливается независимо от ха-

рактера начального распределения по углу ϕ . Подставляя $\alpha(t)$ из (7.77) в (7.89), получаем следующее уравнение для $\gamma(t)$:

$$\tau \dot{\gamma} + \gamma_{\text{cth}} \left(\frac{t}{\tau} \right) - 1 = 0. \quad (7.90)$$

Его решение, удовлетворяющее условию $\gamma(0) = 0$, записывается следующим образом:

$$\gamma(t) = \text{cth} \left(\frac{t}{\tau} \right) - \frac{1}{\text{sh} \left(\frac{t}{\tau} \right)}. \quad (7.91)$$

Отметим, что $\gamma(t) \rightarrow 1$ при $t \gg \tau$. Используя выражение (7.91), легко проинтегрировать уравнение (7.88) для $\beta(t)$:

$$\frac{1}{\beta^2(t)} = \frac{4\tau kT}{J} [t - 2\tau\gamma(t)]. \quad (7.92)$$

Соотношения (7.91) и (7.92) соответствуют медленной диффузии в координатном пространстве.

14. Покажите, что при произвольной потенциальной энергии $E_{\text{п}}(\phi)$ броуновское движение маятника приводит к установлению стационарного распределения по моменту импульса независимо от вида начальных условий.

Решение. Будем искать установившееся при $t \rightarrow \infty$ стационарное решение $P_{\infty}(L, \phi)$ уравнения Фоккера—Планка (7.71) в факторизованном виде:

$$P_{\infty}(L, \phi) = P(L)\sigma(\phi), \quad (7.93)$$

Подставляя выражение (7.93) в уравнение (7.71) и интегрируя по углу ϕ , получаем, считая функции $P(L)$ и $\sigma(\phi)$ нормированными:

$$JkT \frac{d^2}{dL^2} P(L) + (L - L_0) \frac{d}{dL} P(L) + P(L) = 0, \quad (7.94)$$

$$L_0 = -\tau \left\langle \frac{\partial H}{\partial \varphi} \right\rangle = -\tau \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi \sigma(\varphi) \frac{\partial H}{\partial \varphi}, \quad (7.95)$$

представляет собой усредненный по углу ϕ момент импульса, соответствующий «дрейфу» под действием момента силы $-\frac{\partial H}{\partial \varphi}$. Непосредственной подстановкой в уравнение (7.94) можно убе-

даться, что решением (7.94), ограниченным при $L \rightarrow \pm\infty$, является функция

$$P(L) = \frac{1}{\sqrt{2\pi JkT}} \exp\left(-\frac{(L-L_0)^2}{2JkT}\right). \quad (7.96)$$

Это распределение максвелловского вида, центрированное около значения $L = L_0$, определяемого дрейфом в поле внешних сил. Очевидно, что стационарное среднее значение L равно L_0 :

$$\langle L \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dL P(L) L = L_0.$$

Таким образом, для нахождения среднего значения момента импульса L_0 (или среднего значения $\varphi = \frac{L}{J}$) необходимо знать стационарное распределение по углу $\sigma(\phi)$. Напротив, средний квадрат флуктуации момента импульса L можно определить, не решая уравнения для $\sigma(\phi)$. С помощью (7.96) находим

$$\langle (L - L_0)^2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi JkT}} \int_{-\infty}^{\infty} dL \exp\left(-\frac{(L-L_0)^2}{2JkT}\right) (L - L_0)^2 = JkT.$$

15. Найдите спектр высокочастотных ($\omega\tau \gg 1$) незатухающих колебаний в нормальной нейтральной ферми-жидкости, у которой отличен от нуля только нулевой коэффициент A_0 в разложении для корреляционной функции.

Решение. Если в разложении (7.13) отличен от нуля только коэффициент A_0 , интеграл в правой части уравнения (7.15) не зависит от углов θ и ϕ . Обозначая значение этого интеграла через C , получим для функции $\nu(\theta, \phi)$

$$\nu(\theta, \varphi) = C \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta}. \quad (7.97)$$

Эта функция характеризует деформацию ферми-поверхности при колебаниях ферми-жидкости. Формула (7.97) соответствует поверхности вращения, вытянутой вперед по направлению распространения волны и сплюснутой в обратном направлении.

Для определения скорости распространения волны подставим (7.97) в уравнение (7.15) и выполним интегрирование по азиму-

тальному углу ϕ :

$$A_0 \int_0^{\pi} \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta} \frac{\sin \theta^d \theta}{2} = 1. \quad (7.98)$$

Выполняя интегрирование по полярному углу θ , получаем дисперсионное уравнение, определяющее скорость волны u (в единицах скорости квазичастиц на поверхности Ферми):

$$\frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1 = \frac{1}{A_0}. \quad (7.99)$$

Выражение (7.99) вещественно при $s > 1$ (т. е. $u > v_F$), что означает, что незатухающие колебания с акустическим законом дисперсии возможны только при $u > v_F$. Такие колебания получили название нулевого звука Ландау. Функция $\varphi(s) = \frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1$ убывает от ∞ до нуля при изменении s от 1 до ∞ , оставаясь все время положительной. Отсюда следует, что рассматриваемые волны могут существовать только в ферми-жидкости, у которой $A_0 > 0$. Таким образом, распространение нулевого звука возможно только при отталкивании между квазичастицами.

При больших A_0 (сильное взаимодействие) из (7.99) следует, что $s \rightarrow \infty$. Используя разложение логарифма

$$\ln \frac{s+1}{s-1} = 2 \left(\frac{1}{s} + \frac{1}{3s^3} + \dots \right), \quad (s > 1),$$

получаем, что $\varphi(s) \approx \frac{1}{3s^2}$. Отсюда следует, что большим значениям F_0 соответствует скорость нулевого звука, определяемая соотношением

$$s = \sqrt{\frac{A_0}{3}}.$$

При $A_0 \rightarrow 0$ (почти идеальный ферми-газ) из (7.99) следует, что s стремится к единице по закону

$$s - 1 \approx 2e^{-\frac{2}{A_0}}.$$

Таким образом, скорость нулевого звука в слабо неидеальном ферми-газе совпадает со скоростью квазичастиц на ферми-поверхности, т. е. превышает скорость обычного звука в $\sqrt{3}$ раз.

16. Возможность распространения акустических волн в ферми-жидкости при абсолютном нуле температуры означает, что ее энергетический спектр может содержать ветвь, отвечаю-

щую элементарным возбуждениям бозевского типа с импульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ и $\varepsilon = \hbar\omega = up$ — кванты нулевого звука. Является ли в этих условиях выражение (7.11) для вариации казичастичной энергии последовательным? Не следовало ли бы добавить сюда член, соответствующий бозевским возбуждениям?

Решение. Теория нормальной ферми-жидкости основана на представлениях о хорошо определенных квазичастицах фермиевского типа. Это означает что квантовая неопределенность значения энергии квазичастицы, связанная со столкновениями, (т. е. величина порядка $\frac{\hbar}{\tau}$, где τ — время свободного пробега), должна быть мала по сравнению с шириной области температурного размытия функции распределения:

$$\frac{\hbar}{\tau} \ll T.$$

Вероятность столкновения $\left(\frac{1}{\tau}\right)$ пропорциональна квадрату ширины области температурного размытия, т. е. $\tau \sim T^{-2}$.

Отсюда следует, что теория нормальной ферми-жидкости справедлива только при значениях температуры, соответствующих неравенству $T \ll \varepsilon_F$. Для жидкого He^3 энергия Ферми соответствует температуре 2,5 К, а область количественной применимости теории, (как показывает эксперимент) ограничена температурами $T \leq 0,1$ К.

Фермиевская ветвь спектра возбуждений дает вклад в теплоемкость, пропорциональную T , в то время как бозевская ветвь — пропорциональную T^3 . Поэтому при столь низких температурах вкладом бозевской ветви в термодинамические величины можно пренебречь, и выражение (7.11) является последовательным.

17. Найдите спектр асимметричных высокочастотных незатухающих колебаний в нормальной ферми-жидкости, у которой отличны от нуля два первых коэффициента A_0 и A_1 в разложении (7.13) для корреляционной функции.

Решение. Когда отличны от нуля только коэффициенты A_0 и A_1 , формулы (7.13) и (7.16) позволяют записать выражение для $A(\chi)$ в виде

$$A = A_0 + 3A_1 (\cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi')).$$

При таком виде корреляционной функции в ферми-жидкости могут распространяться не только симметричные, но и асиммет-

ричные волны нулевого звука с $\nu \sim e^{\pm i\phi}$. Положив, например, $\nu = f(\theta)e^{-i\phi}$ и выполнив в (7.15) интегрирование по ϕ' , получим

$$(s - \cos \theta) f(\theta) = \frac{A_1}{4} \cos \theta \sin \theta \int_0^\pi f(\theta') \sin^2 \theta' d\theta'.$$

Обозначив интеграл по углу θ' через C , для функции $\nu(\theta, \phi)$ получаем

$$\nu(\theta, \phi) = C \frac{\sin \theta \cos \theta}{s - \cos \theta} e^{i\phi}.$$

Подставляя это выражение в уравнение (7.15) и выполняя интегрирование по ϕ' , получаем дисперсионное уравнение для определения скорости распространения асимметричных нульзвуковых волн:

$$\int_0^\pi \frac{\sin^3 \theta \cos \theta}{s - \cos \theta} d\theta = \frac{4}{3A_1}.$$

Интеграл в левой части этого равенства является монотонно убывающей функцией s . Его наибольшее значение достигается при $s = 1$. Вычислив интеграл при $s = 1$, найдем, что распространение асимметричной волны рассмотренного вида возможно при $A_1 > 2$. Отметим, что для He^3 значения A_0 и A_1 составляют соответственно 10,8 и 2,1.

18. Покажите, что любые асимметричные нуль-звуковые волны в нормальной ферми-жидкости происходят без изменения плотности жидкости. Меняется ли плотность при симметричных нуль-звуковых колебаниях?

Решение. Для ответа на первый вопрос задачи достаточно показать, что при любых асимметричных колебаниях нуль-звукового типа выполняется равенство

$$\int \nu(\theta, \varphi_0) d\Omega = 0, \quad (7.100)$$

означающее, что объем, заключенный внутри ферми-поверхности, остается неизменным. Для асимметричных волн, где $\nu \sim e^{\pm im\phi}$, выполнение этого условия очевидно благодаря наличию в (7.100) интеграла по ϕ . Для симметричной моды нулевого звука, используя выражение (7.100), получим

$$\int \nu(\theta, \varphi) d\Omega = C2\pi \int_0^\pi \frac{\cos \theta \sin \theta d\theta}{s - \cos \theta}. \quad (7.101)$$

Это выражение отлично от нуля, что означает, что плотность жидкости изменяется при колебаниях. Выражение (7.101) входит в дисперсионное уравнение (7.98) для симметричной моды нулевого звука. Как уже отмечалось, функция (7.97) соответствует определенной деформации ферми-поверхности при колебаниях: ферми-поверхность вытягивается вперед по направлению распространения волны и сплющивается в обратном направлении.

Отметим, что в обычной звуковой волне у сферической ферми-поверхности колеблется только ее радиус — граничный импульс Ферми колеблется вместе с плотностью жидкости. При этом сферическая ферми-поверхность смещается как целое на величину, связанную со скоростью движения жидкости в волне:

$$\nu = \delta p_F + C \cos \theta.$$

Этот результат становится особенно понятным, если учесть, что обычный звук распространяется в условиях термодинамического квазиравновесия ($\omega\tau \ll 1$), тогда как распространение нулевого звука происходит в существенно неравновесных условиях ($\omega\tau \gg 1$).

19. Получите общее дисперсионное уравнение для спектра коллективных возбуждений нормальной ферми-жидкости при произвольном числе отличных от нуля коэффициентов A_n разложения корреляционной функции (7.13).

Решение. Подставим разложение (7.13) в уравнение (7.15):

$$(s - \cos \theta) \nu(\theta) = \cos \theta \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) A_n \sum_{m=-n}^n \frac{(n-|m|)!}{(n+|m|)!} P_n^m(\cos \theta) \times \\ \times e^{im\varphi} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} P_n^m(\cos \theta') e^{-im\varphi'} \nu(\theta', \varphi'). \quad (7.102)$$

Вводим обозначение

$$\Phi_{nm} = (2n+1) A_n \frac{(n-|m|)!}{(n+|m|)!} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} P_n^m(\cos \theta') e^{-im\varphi'} \nu(\theta', \varphi'). \quad (7.103)$$

Из уравнения (7.102) при учете (7.103) получаем следующее выражение для $\nu(\theta, \phi)$:

$$\nu(\theta, \varphi) = \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \Phi_{nm} P_n^m(\cos \theta) e^{im\varphi}.$$

Подставляя это значение $\nu(\theta, \phi)$ в определение (7.103) и интегрируя по углу φ' , приходим к соотношению

$$(2n + 1) A_n \frac{(n - |m|)!}{(n + |m|)!} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \frac{\cos \theta'}{s - \cos \theta'} P_n^m(\cos \theta') \times \\ \times \sum_{k=0}^{\infty} P_k^m(\cos \theta') \Phi_{km} = \sum_{k=0}^{\infty} \Phi_{km} \delta_{kn}. \quad (7.104)$$

Соотношения (7.104) представляют собой систему линейных однородных уравнений для определения величины Φ_{km} . Эта система распадается на m независимых подсистем, соответствующих различным значениям m . Это означает, что в нормальной ферми-жидкости при абсолютном нуле температуры могут распространяться нуль-звуковые колебания различных типов, характеризующиеся различной зависимостью амплитуды от углов θ и ϕ . Значение $m = 0$ соответствует симметричным колебаниям, для которых $\nu = \nu(\theta)$ изотропно в плоскости, перпендикулярной волновому вектору \mathbf{k} . При $m \neq 0$ колебания поляризованы определенным образом в этой плоскости. Число типов таких колебаний определяется числом возможных значений m ($|m| \leq n$). Дисперсионное уравнение для определения скоростей таких колебаний получается как условие существования ненулевых решений у систем уравнений, на которые распадается система (7.104). По теореме Крамера при каждом m имеем

$$\det |\delta_{kn} + (2n + 1) F_n \Omega_{kn}^m(s)| = 0, \quad (n, k \geq |m|), \quad (7.105)$$

где

$$\Omega_{kn}^m(s) = \frac{(n - |m|)!}{(n + |m|)!} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \frac{\cos \theta'}{\cos \theta' - s} P_n^m(\cos \theta') P_k^m(\cos \theta'). \quad (7.106)$$

Благодаря свойству присоединенных полиномов Лежандра $P_n^{-m} = P_n^m$ значение величины $\Omega_{kn}^m(s)$ не зависит от знака m . Это значит, что волны, различающиеся знаком m , распространяются с одинаковой скоростью.

Уравнение (7.104) является трансцендентным. Вещественные корни, соответствующие незатухающим колебаниям, есть не всегда. Это зависит от значения коэффициентов A_n . Иногда имеется несколько вещественных корней. Это соответствует нескольким типам колебаний с одинаковой поляризацией в плоскости, перпендикулярной волновому вектору \mathbf{k} .

20. Используя дисперсионное уравнение (7.105), полученное в предыдущей задаче, исследуйте спектр коллективных возбуж-

дений в нормальной ферми-жидкости, где для корреляционной функции $A(\chi)$ справедливо приближение

$$A(\chi) = A_0 + 3A_1 (\cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi')).$$

Решение. При заданном виде корреляционной функции из (7.105) следуют такие дисперсионные уравнения:

$$\begin{vmatrix} 1 + A_0 \Omega_{00}^0 & 3A_1 \Omega_{01}^0 \\ A_0 \Omega_{10}^0 & 1 + 3A_1 \Omega_{11}^0 \end{vmatrix} = 0, \quad m = 0, \quad (7.107)$$

$$1 + 3A_1 \Omega_{11}^1 = 0, \quad |m| = 1. \quad (7.108)$$

Вычисление входящих в уравнения (7.107) и (7.108) коэффициентов Ω_{kn}^m с помощью формулы (7.106) приводит к следующему результату:

$$\Omega_{00}^0 = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{x dx}{x-s} = 1 - \frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} = -\varphi(s),$$

$$\Omega_{10}^0 = \Omega_{01}^0 = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{x^2 dx}{x-s} = -s\varphi(s), \quad (7.109)$$

$$\Omega_{11}^0 = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{x^3 dx}{x-s} = \frac{1}{3} - s^2 \varphi(s),$$

$$\Omega_{11}^1 = \frac{1}{4} \int_{-1}^1 \frac{1-x^2}{x-s} dx = \frac{1}{2} \left[(s^2 - 1)\varphi - \frac{1}{3} \right].$$

С помощью выражений (7.109) дисперсионные уравнения (7.107) и (7.108) симметричной ($m = 0$) и асимметричной ($|m| = 1$) ветвей нулевого звука записываются следующим образом:

$$\varphi(s) = \frac{1 + A_1}{A_0 + A_0 A_1 + 3A_1 s^2}, \quad (m = 0), \quad (7.110)$$

$$\varphi(s) = \frac{A_1 - 2}{3A_1(s^2 - 1)}, \quad (|m| = 1). \quad (7.111)$$

Отметим, что при $A_1 = 0$ дисперсионное уравнение (7.110) переходит в уравнение, полученное в случае, когда отличен от нуля только коэффициент A_0 .

Уравнение, описывающее асимметричные колебания, имеет вещественный корень при $A_1 > 2$ ($A_0, A_1 > 0$). Для He^3 эксперимент дает $A_0 = 10,8$; $A_1 = 2,1$. Поэтому в жидком He^3 возможно распространение как продольных нуль-звуковых колебаний при $m = 0$, так и при поперечных нуль-звуковых колебаний при $|m| = 1$. Эксперимент подтверждает этот результат теории. Для приведенных значений параметров A_0 и A_1 уравнение (7.110) имеет единственное решение $s = \frac{u}{v_F} \approx 3,6$. Скорость Ферми v_F в He^3 составляет примерно 53 м/с. Поэтому скорость нулевого звука с $m = 0$ оказывается равной ~ 194 м/с. Асимметричная мода колебаний с $|m| = 1$ распространяется со скоростью $u \approx 54$ м/с.

21. Исследуйте вопрос о числе ветвей незатухающих нуль-звуковых колебаний в He^3 , где известные значения параметров ферми-жидкостного взаимодействия составляют $A_0 = 10,8$; $A_1 = 2,1$.

Решение. Как мы видели в задаче 19, колебания, соответствующие разным значениям m , независимы друг от друга. Поэтому будем искать решение уравнения (7.102), справедливого при произвольном числе слагаемых в разложении для $A(\chi)$, в виде

$$\nu(\theta, \phi) = f_m(\theta) e^{im\phi}. \quad (7.112)$$

Подставляя это выражение в (7.102) и используя свойство присоединенных полиномов Лежандра, преобразуем это уравнение к виду

$$(s - \cos \theta) f_m(\theta) = \cos \theta \sum_{n=m}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2}\right) A_n \frac{(n-m)!}{(n+m)!} \times \\ \times P_n^m(\cos \theta) \int_0^{\pi} d\theta' \sin \theta' P_n^m(\cos \theta') f_m(\theta'). \quad (7.113)$$

Уравнение (7.113) может иметь не нулевые решения только в том случае, если среди коэффициентов A_n с $n \geq m$ существуют отличные от нуля. Незатухающим колебаниям соответствуют значения $s > 1$, что накладывает определенные ограничения на значения A_n , при которых возможны такие колебания. Коэффициенты A_n разложения корреляционной функции $A(\chi)$ быстро убывают с ростом n . Поэтому для выяснения условий существования решений уравнения (7.113) можно в простейшем приближении ограничиваться первым слагаемым в правой части,

положив $A_m \neq 0$, $A_n = 0$ при $n > m$. В этом приближении из (7.113) имеем

$$f_m(\theta) = \text{const} \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta} P_m^m(\cos \theta),$$

а дисперсионное уравнение для s принимает вид

$$\frac{F_m \left(m + \frac{1}{2} \right)}{(2m)!} \int_0^\pi \frac{d\theta \sin \theta \cos \theta [P_m^m(\cos \theta)]^2}{s - \cos \theta} = 1. \quad (7.114)$$

Учитывая, что

$$P_m^m(\cos \theta) = \frac{(2m)!}{2^m m!} (1 - \cos^2 \theta)^{\frac{m}{2}},$$

уравнение (7.114) можно записать следующим образом:

$$\frac{(2m+1) F_m}{2^{2m} (m!)^2} \int_0^1 \frac{dx x^2 (1-x^2)^m}{s^2 - x^2} = 1. \quad (7.115)$$

В области $s > 1$ интеграл в (7.115) является монотонно убывающей функцией s . При $m = 0$ величина интеграла при изменении s в области $1 < s < \infty$ может принимать любые положительные значения. Поэтому для $m = 0$ незатухающее решение уравнения (7.115) существует при $A_0 > 0$.

При $m \geq 1$ этот интеграл при всех $s \geq 1$ остается конечным и достигает наибольшего значения при $s = 1$. Таким образом, условие существования решения с $s > 1$ при $m \geq 1$ имеет вид

$$\frac{1}{A_m} < \frac{(2m+1)!}{2^{2m} (m!)^2} \int_0^1 dx x^2 (1-x^2)^{m-1}. \quad (7.116)$$

Вычисление интеграла в (7.116) дает

$$\int_0^1 dx x^2 (1-x^2)^{m-1} = \frac{2^{2m} (m!)^2}{2m(2m+1)!}. \quad (7.117)$$

Подставляя (7.117) неравенство (7.116), получаем условие на A_m , при котором возможны незатухающие моды с данными значениями m :

$$F_m > 2m. \quad (7.118)$$

Это условие выполняется в He^3 для A_0 и A_1 . Что касается высших мод нулевого звука с $m \geq 2$, то их распространение в He^3 в соответствии с неравенством (7.118) оказывается невозможным. Уже при $m = 2$ это условие дает $A_2 > 4$, что представляется совершенно нереальным, поскольку естественно ожидать, что $A_2 \ll A_1 = 2,1$.

Условие существования незатухающих решений (7.118) можно уточнить, если в уравнении (7.113) учесть слагаемые с $n \geq m + 1$.

22. Исследуйте вопрос об устойчивости основного состояния нормальной ферми-жидкости с притяжением между квазичастицами, рассматривая простейшую модель нуль-звуковых колебаний в системе, когда в разложении для корреляционной функции отличен от нуля только один коэффициент A_0 .

Решение. В рассматриваемом случае дисперсионное уравнение для определения скорости нуль-звуковых колебаний имеет вид

$$\frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1 = \frac{1}{A_0}. \quad (7.119)$$

Как уже отмечалось в задаче 15, при $A_0 > 0$ имеется только один вещественный корень $s > 1$, что соответствует незатухающим колебаниям в системе с отталкиванием между квазичастицами.

Рассмотрим случай, когда между квазичастицами системы существует слабое притяжение, так что

$$-1 < A_0 < 0. \quad (7.120)$$

В этом случае корень уравнения (7.119) будет комплексным, что соответствует затухающим нуль-звуковым колебаниям. При сильном притяжении между квазичастицами, когда

$$A_0 < -1, \quad (7.121)$$

нуль-звуковая мода оказывается неустойчивой. Это означает, что состояние системы, которое мы считали основным, самопроизвольно переходит в другое состояние, характеризующееся постоянными флуктуациями величины, связанной с неустойчивой модой. Покажем справедливость этого утверждения.

Заменяем в дисперсионном уравнении (7.119) s на $s + i\delta$, ($\delta \rightarrow +0$). При $s > 1$ никаких изменений в дисперсионном уравнении не произойдет. Если же $s < 1$, то логарифмическая функция заменится на

$$\ln \frac{s+1}{s-1} - i\pi.$$

Теперь мнимая часть в дисперсионном уравнении играет важную роль, будучи сравнимой с вещественной частью. Для отрицательных не слишком больших по модулю A_0 дисперсионное уравнение обладает одним комплексным корнем, который соответствует затухающей коллективной моде.

Механизм затухания, существенного в пренебрежении столкновениями квазичастиц ($\omega\tau \gg 1$), похож на механизм бесстолкновительного затухания Ландау в плазменных колебаниях. Он соответствует когерентному взаимодействию коллективной моды с теми частицами, которые держатся на гребне бегущей волны. Это явление возможно, если фазовая скорость волны меньше v_F , т. е. $s < 1$. Такое резонансное взаимодействие можно представить как реальный переход, сопровождающийся распадом коллективной моды с возбуждением одной пары квазичастица—квазидырка. С формальной точки зрения замена $s \rightarrow s + i\delta$ соответствует определенному правилу (правилу Ландау) обхода полюса при вычислении интеграла в (7.98).

В некоторых случаях дисперсионное уравнение может иметь два чисто мнимых комплексно сопряженных корня. Один из них соответствует экспоненциально нарастающим волнам. Это соответствует неустойчивости системы.

Рассмотрим чисто мнимый корень уравнения (7.119) $s = i\alpha$, где α — вещественное число. Используя известное свойство логарифмической функции, уравнение (7.119) в этом случае можно переписать в виде

$$\alpha \operatorname{arctg} \frac{1}{\alpha} - 1 = \frac{1}{A_0}. \quad (7.122)$$

Нетрудно убедиться, что уравнение (7.122) имеет два вещественных решения противоположного знака, если A_0 лежит в интервале $(-1, 0)$. Таким образом, условие устойчивости нулевого звука имеет вид

$$A_0 < -1.$$

Если притяжение между квазичастицами достаточно велико, нулевой звук сменяется неустойчивой модой. Такие неустойчивости возникают и в общем случае при произвольном виде корреляционной функции $F(\chi)$. Они могут подавить любую коллективную моду. Появляется бесконечное число критериев неустойчивости типа (7.119).

23. В отсутствие внешнего магнитного поля кинетическое уравнение для векторной функции $\delta\sigma$ распределения нормаль-

ной нейтральной ферми-жидкости имеет вид, аналогичный (7.12) и при $\omega\tau \gg 1$ записывается следующим образом:

$$\frac{\partial \delta \boldsymbol{\sigma}}{\partial t} + (\nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon_0 \cdot \nabla_{\mathbf{r}}) \left(\delta \boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \delta \boldsymbol{\varepsilon} \right) = 0. \quad (7.123)$$

При этом связь между вариацией $\delta \varepsilon$ и возмущением спиновой плотности $\delta \boldsymbol{\sigma}$ аналогична (7.11):

$$\delta \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \psi(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p}', \mathbf{r}, t). \quad (7.124)$$

Исследуйте возможность распространения спиновых волн в He^3 , у которого поверхность Ферми сферически симметрична.

Решение. Изотропия ферми-поверхности позволяет использовать для корреляционной функции $\psi(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ разложение по полиномам Лежандра

$$B(\chi) = \rho(\varepsilon_F) \psi(\chi) = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) B_n P_n(\cos \chi), \quad (7.125)$$

где χ — угол между векторами \mathbf{p}_F и \mathbf{p}'_F . Записывая выражение для возмущения спиновой плотности $\delta \boldsymbol{\sigma}$ вблизи ферми-поверхности в виде

$$\delta \boldsymbol{\sigma} = \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \mathbf{v}(\Omega) e^{i\mathbf{kr} - i\omega t}, \quad (7.126)$$

приходим с помощью приведенных соотношений к уравнению для функции $\mathbf{v}(\Omega)$, аналогичному (7.15)

$$(s - \cos \theta) \mathbf{v}(\Omega, \varphi) = \cos \theta \int \frac{d\Omega'}{4\pi} B(\chi) \nu(\theta', \varphi'), \quad (7.127)$$

где, как и раньше, $s = \frac{\omega}{kv_F}$ — скорость волны в единицах фермиевской скорости квазичастиц.

Дальнейшее исследование этого уравнения проводится точно так же, как проводилось исследование уравнения (7.15) в предыдущих задачах в различных частных случаях.

Для каждой из компонент вектора \mathbf{v} получается уравнение, отличающееся от (7.15) только заменой функции $A(\chi)$ на $B(\chi)$. Колебания, в которых зависимость \mathbf{v} от ϕ имеет вид $e^{im\phi}$, независимы для разных значений m , а соответствующая зависимость от θ не меняется при замене m на $-m$. Далее, условие существования незатухающих решений при фиксированном значении $m \geq 0$ в простейшем приближении для корреляционной функции $B(\chi)$,

в котором $B_m \neq 0$, $B_n = 0$ ($n \geq m + 1$), аналогично условию (7.118) и имеет вид

$$B_m > 2m.$$

Для $m = 0$, т. е. для изотропных в плоскости, перпендикулярной \mathbf{k} , возмущений это дает $B_0 > 0$. Для жидкого He^3 величина B_0 отрицательна ($B_0 \approx -0,67$). Поэтому распространение рассматриваемых волн в этой жидкости невозможно. Отметим, что и уточненное условие существования незатухающих решений, получаемое при учете коэффициентов B_n ($n \geq m + 1$), не меняет этого вывода в отношении квантовой жидкости He^3 .

24. Найдите скорость распространения низкочастотного ($\omega\tau \ll 1$) звука в сверхтекучем гелии II, исходя из линеаризованных уравнений двухскоростной гидродинамики (7.18)–(7.20).

Решение. Исключим импульс \mathbf{j} из уравнения непрерывности (7.17) и уравнения (7.18). Взяв производную по времени от первого из этих уравнений и дивергенцию от второго, придем к соотношению

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = \nabla^2 p. \quad (7.128)$$

Исключим теперь скорости нормального и сверхтекучего движения из уравнений (7.19) и (7.20). Для этого воспользуемся термодинамическим соотношением

$$d\mu = -s dT + dp/\rho, \quad (7.129)$$

где $s = \frac{S}{\rho}$. Из (7.129) следует равенство

$$\nabla p = \rho \nabla \mu + \rho s \nabla T. \quad (7.130)$$

Подставляя сюда ∇p из (7.18) и $\nabla \mu$ из (7.20), получим вместо (7.130)

$$\rho_n \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_s) + \rho s \nabla T = 0. \quad (7.131)$$

В очевидное тождество

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial (s\rho)}{\partial t} - \frac{s}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

подставляем $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ из уравнения непрерывности (7.17) и $\frac{\partial (s\rho)}{\partial t}$ из уравнения (7.19). Получаем

$$\frac{\partial s}{\partial t} = -s \operatorname{div} \mathbf{v}_n + \frac{s}{\rho} \operatorname{div} \mathbf{j} = \frac{s\rho_s}{\rho} \operatorname{div} (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_n),$$

откуда

$$\operatorname{div}(\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_n) = \frac{\rho}{s\rho_s} \frac{\partial s}{\partial t}. \quad (7.132)$$

Беря дивергенцию от соотношения (7.131) и подставляя получающийся результат в (7.132), приходим к уравнению

$$\frac{\partial^2 s}{\partial t^2} = \frac{\rho_s}{\rho_n} s^2 \nabla^2 T. \quad (7.133)$$

Уравнения (7.128) и (7.133) определяют изменения термодинамических величин в звуковой волне в сверхтекучей жидкости. Поскольку этих уравнений два, то существуют две скорости распространения звука. Для определения этих скоростей выразим давление и температуру через энтропию и плотность и перепишем уравнения (7.128) и (7.133) в виде

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s \nabla^2 \rho + \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_\rho \nabla^2 s, \quad (7.134)$$

$$\frac{\partial^2 s}{\partial t^2} = \frac{\rho_s}{\rho_n} s^2 \left[\left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_s \nabla^2 \rho + \left(\frac{\partial T}{\partial s} \right)_\rho \nabla^2 s \right]. \quad (7.135)$$

Решения этих уравнений ищем в виде плоских волн, например

$$\rho = \rho_0 + \rho_1 e^{i\omega(t - \frac{x}{u})},$$

где ω — частота, а u — скорость звука вдоль оси x . Теперь вместо (7.134) и (7.135) получим

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{u}{u_1} \right)^2 - 1 \right] \rho_1 - \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_\rho \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_s s_1 &= 0, \\ \left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_s \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_\rho \rho_1 - \left[\left(\frac{u}{u_2} \right)^2 - 1 \right] s_1 &= 0. \end{aligned} \quad (7.136)$$

Здесь использованы обозначения

$$u_1^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s, \quad (7.137)$$

$$u_2^2 = \frac{\rho_s}{\rho_n} s^2 \left(\frac{\partial T}{\partial s} \right)_\rho. \quad (7.138)$$

Условие существования ненулевых решений у системы уравнений (7.136) представляет собой дисперсионное уравнение для определения скорости распространения звуковых колебаний:

$$\left[\left(\frac{u}{u_1} \right)^2 - 1 \right] \left[\left(\frac{u}{u_2} \right)^2 - 1 \right] = \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_\rho \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_s s_1 \left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_s \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_\rho. \quad (7.139)$$

Используя правила преобразования термодинамических переменных, убеждаемся, что правая часть (7.141) равна $\frac{C_p - C_v}{C_p}$. Благодаря аномальной малости коэффициента теплового расширения гелия II ниже λ -точки его теплоемкости C_p и C_v практически одинаковы, так что дисперсионное уравнение (7.139) принимает вид

$$\left[\left(\frac{u}{u_1} \right)^2 - 1 \right] \left[\left(\frac{u}{u_2} \right)^2 - 1 \right] = 0. \quad (7.140)$$

Итак, формулы (7.137) и (7.138) определяют два приближенных корня дисперсионного уравнения. Первый корень определяет скорость обычного (называемого «первым») звука. С такой скоростью распространяются в гелии II колебания давления или плотности. В волнах первого звука гелий движется как целое. Второй корень определяет скорость распространения «второго» звука. С такой скоростью распространяются колебания температуры или энтропии. Возможность распространения незатухающих температурных волн является специфическим свойством сверхтекучего гелия.

25. С помощью соотношений, полученных в предыдущей задаче, исследуйте зависимость от температуры скоростей первого и второго звука в гелии II и убедитесь в справедливости приведенных утверждений относительно физической природы этих звуков.

Решение. Скорость u_1 первого звука, определяемая формулой (7.137), почти постоянна, а скорость u_2 второго звука сильно зависит от температуры, обращаясь в нуль вместе с ρ_s . Вблизи λ -точки $\rho_n \approx \rho$ и поэтому из (7.138) имеем

$$u_2^2 \approx \frac{\rho_s s^2}{\rho} \left(\frac{\partial T}{\partial s} \right)_\rho = \rho_s s^2 \left(\frac{\partial T}{\partial \rho s} \right)_\rho = \frac{T s^2}{C_p} \rho_s. \quad (7.141)$$

При самых низких температурах почти все элементарные возбуждения в гелии II являются фононами. Поэтому нетрудно убедиться, что вблизи абсолютного нуля температуры справедливо следующее соотношение:

$$C = T \frac{\partial s}{\partial T} = 3s. \quad (7.142)$$

При $T = 0$ нормальная часть плотности обращается в нуль; вся жидкость может совершать только сверхтекучее движение, поэтому

$$\rho_s \approx \rho. \quad (7.143)$$

Для получения явного выражения для ρ_n вблизи абсолютного нуля температуры воспользуемся формулой

$$\rho_n = -\frac{1}{3} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{dn}{d\epsilon} \right) p^2. \quad (7.144)$$

Вблизи $T = 0$ основной вклад в ρ_n дают фононы. Полагая в (7.144) $\epsilon = u_1 p$, имеем

$$(\rho_n)_\phi = -\frac{1}{3u_1} \int_0^\infty \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} p^2 \frac{dn}{dp},$$

а после интегрирования по частям

$$(\rho_n)_\phi = \frac{4}{3u_1} \int_0^\infty \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} p n = \frac{4}{3u_1} \int \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3} \epsilon n. \quad (7.145)$$

Интеграл, стоящий в правой части (7.145), представляет собой энергию единицы объема фоновонного газа. Подставляя ее значение из (4.67), получим

$$(\rho_n)_\phi = \frac{2\pi^2 T^4}{45\hbar^3 u_1^5} = \frac{T c p}{3u_1}. \quad (7.146)$$

Подставляя выражение (7.142), (7.143) в формулу (7.141) для u_2^2 , получим

$$u_2 = \frac{u_1}{\sqrt{3}} \quad (T \rightarrow 0). \quad (7.147)$$

Этот результат означает, что второй звук можно рассматривать как волны сжатия и разрежения в газе элементарных возбуждений, поскольку колебания температуры приводят к колебаниям плотности тепловых возбуждений. Скорость второго звука — это скорость звука в газе возбуждений, а предельное значение $u_2 = \frac{u_1}{\sqrt{3}}$ при $T \rightarrow \infty$ соответствует общему результату для скорости звука в газе квазичастиц с энергетическим спектром $\epsilon = u_1 p$.

В волне первого звука, распространяющегося со скоростью u_1 , энтропия не меняется, а колеблется плотность. Действительно, из первого уравнения (7.136) следует, что при $u \approx u_1$ $\rho_1 \neq 0$, а $s_1 = 0$. Из уравнения (7.133) при этом следует, что $\nabla T = 0$, а из (7.131) видно, что $\mathbf{v}_s = \mathbf{v}_n$. Это соответствует распространению волны плотности в гелии II с практически постоянной энтропией при совместном движении нормальной и сверхтекучей компонент, причем скорость равна обычной скорости звука,

определяемой формулой $u^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)$. В волне второго звука, распространяющегося со скоростью \dot{u}_2 , не меняется плотность, а колеблется энтропия (или температура): из второго уравнения (7.136) видно, что при $u \approx u_2$ $\rho_1 = 0$, а $s_1 \neq 0$. Из уравнения (7.128) при этом следует, что $\nabla p = 0$, из уравнения (7.17) — что $\rho_s \mathbf{v}_s + \rho_n \mathbf{v}_n = 0$. Эти условия соответствуют распространению волн энтропии при почти постоянной полной плотности. При этом нормальная и сверхтекучая компоненты гелия II движутся в противофазе, что обеспечивает равенство нулю суммарного потока массы.

§ 7.5. Задачи для самостоятельного решения

1. Пользуясь уравнением Больцмана, получить равновесную функцию распределения для системы, находящейся в постоянном во времени внешнем поле.

2. Показать, что уравнение Больцмана необратимо, т. е. если $f(\mathbf{x}, t)$ — решение, то $f(-\mathbf{x}, -t)$ не обязано быть таковым.

3. Уточните условие (7.118) существования незатухающих мод нулевого звука с заданным значением m , учтя в уравнении (7.113) слагаемые с $n \geq m + 1$. Покажите, что это условие записывается в виде

$$A_m > 2m \frac{1 - \frac{3A_{m+1}}{2m}}{1 + A_{m+1}}.$$

4. Найдите скорость распространения звуковых волн в сверхтекучем гелии II в узких капиллярах, когда длина свободного пробега квазичастиц становится сравнимой с диаметром трубки и нормальная компонента жидкости неподвижна: $\mathbf{v}_n = 0$. Воспользоваться линеаризованной системой гидродинамических уравнений в приближении $\mathbf{v}_n = 0$ и пренебречь тепловым расширением жидкости.

Список литературы

1. *Ахизер А.И., Пелетминский С.В.* Методы статистической физики. — М.: Наука, 1977. — 367 с.
2. *Базаров И.П., Геворкян Э.В., Николаев П.Н.* Термодинамика и статистическая физика. Теория равновесных систем. — М.: Изд-во МГУ, 1986. — 310 с.
3. *Балеску Р.* Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. 1. — М.: Мир, 1978. — 405 с., Т. 2. М.: Мир, 1978. — 399 с.
4. *Боголюбов Н.Н.* Избранные труды по статистической физике. — М.: МГУ, 1979. — 342 с.
5. *Гуров К.П.* Основания кинетической теории. — М.: Наука, 1966. — 351 с.
6. *Зубарев Д.Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. — М.: Наука, 1971. — 415 с.
7. *Исихара А.* Статистическая физика. — М.: Мир, 1973. — 471 с.
8. *Квасников И.А.* Термодинамика и статистическая физика. Теория неравновесных систем. — М.: Изд-во МГУ, 1987. — 559 с.
9. *Хуанг Керзон.* Статистическая механика. — М.: Мир, 1966. — 520 с.
10. *Киттель Ч.* Статистическая термодинамика. — М.: Наука, 1977. — 336 с.
11. *Климонтович Ю.Л.* Статистическая физика. — М.: Наука, 1982. — 608 с.
12. *Куни Ф.М.* Статистическая физика и термодинамика. — М.: Наука, 1981 — 351 с.
13. *Леонтович М.А.* Введение в термодинамику. Статистическая физика. — М.: Наука, 1983. — 416 с.
14. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. Ч.1. — М.: Физматлит, 2001. — 616 с.
15. *Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Физическая кинетика. — М.: Физматлит, 2002. — 536 с.
16. *Силин В.П.* Введение в кинетическую теорию газов. — М.: Наука, 1977. — 331 с.

-
17. Уленбек Дж., Форд Дж. Лекции по статистической механике. — М.: Мир, 1965. — 307 с.
 18. Фейнман Р. Статистическая механика. — М.: Мир, 1975. — 407 с.
 19. Елютин П.В., Кривченко В.Д. Квантовая механика с задачами. — М.: Наука, 1976. — 330 с.
 20. Флюге З. Задачи по квантовой механике. Т. 1, 2. — М.: Мир, 1974.

Учебное издание

КОНДРАТЬЕВ Александр Сергеевич
РАЙГОРОДСКИЙ Петр Александрович

**ЗАДАЧИ ПО ТЕРМОДИНАМИКЕ, СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ
И КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ**

Редактор *В.С. Ярунин*
Оригинал-макет: *А.М. Садовский*
Оформление переплета: *Д.Б. Белуха*

Подписано в печать 06.08.2007. Формат 60×90/16. Бумага офсетная.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 16. Уч.-изд. л. 16. Тираж 1500 экз.
Заказ № 1362

Издательская фирма «Физико-математическая литература»
МАИК «Наука/Интерпериодика»
117997, Москва, ул. Профсоюзная, 90
E-mail: fizmat@maik.ru, fmlsale@maik.ru;
<http://www.fml.ru>

Отпечатано с готовых диапозитивов
в ООО «Чебоксарская типография № 1»
428019, г. Чебоксары, пр. И. Яковлева, 15

ISBN 978-5-9221-0876-8



9 785922 108768