

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РФ

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра теоретической физики

Г. Л. Коткин, Е. Г. Образовский

**ЗАДАЧИ ДЛЯ СЕМИНАРОВ
ПО СТАТИСТИЧЕСКОЙ
ФИЗИКЕ**

Учебное пособие

Новосибирск
2012

ББК В317.2я 73–4

УДК 543.145

К-735

Коткин Г. Л., Образовский Е. Г. Задачи для семинаров по статистической физике: Учеб. пособие / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2012. 191 с.

ISBN 978-5-94356-550-2

Учебное пособие представляет собой конспект семинаров и большое количество дополнительных задач для самостоятельного решения и основано на многолетнем опыте преподавания курса “Статистическая физика” студентам-бакалаврам физического факультета НГУ. В учебное пособие включены те темы, которые нужны студенту для изучения равновесных и неравновесных свойств классических и квантовых систем: повторение вопросов термодинамики, микроканоническое и каноническое распределения,ферми- и бозе-газ, неидеальные газы, фазовые переходы 1-го и 2-го рода, флюктуации, броуновское движение, кинетическое уравнение Больцмана.

Рецензенты

д-р физ. мат. наук, профессор Д. А. Шапиро

д-р физ. мат. наук, профессор В. Ф. Дмитриев

Учебное пособие разработано в рамках реализации Программы развития НИУ-НГУ на 2009-2018 г. г.

© Новосибирский государственный
университет, 2012

© Г. Л. Коткин, Е. Г. Образовский,

ISBN 978-5-94356-550-2 2012

Оглавление

1. Термодинамика	4
2. Микроканоническое распределение	12
3. Каноническое распределение	21
4. Распределение Максвелла	35
5. Тепловые свойства молекул	41
6. Вырожденный ферми-газ	47
7. Ферми-газ при ненулевой температуре	59
8. Полупроводники	68
9. Бозе-газ во внешнем поле	72
10.Фотоны. Фононы	80
11. Неидеальный классический газ	91
12.Фазовые переходы I рода	98
13. Фазовые переходы II рода (критические явления)	108
14.Флуктуации	121
15.Броуновское движение	139
16.Уравнение Больцмана	160
А Теплоёмкость подвешенного шарика	180
В Математическое дополнение	186
Список литературы	189

1. Термодинамика

Задача 1. Найти изменение температуры воды при конвективном переносе на глубину 1 км с поверхности, считая что теплообмена за время погружения нет. Теплоемкость воды $C_p = 4 \text{ кДж/кг К}$, коэффициент теплового расширения $\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = 1,3 \cdot 10^{-4} \text{ К}^{-1}$.

Решение:

Поскольку теплообмена нет, то $S = Const$.

$$\begin{aligned} \Delta T &= \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_S \Delta P, \quad \Delta P = \rho g h. \\ \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_S &= \frac{D(T, S)}{D(P, S)} = \frac{D(T, S)}{D(T, P)} \Bigg/ \frac{D(P, S)}{D(T, P)} = \\ &= - \frac{T}{C_p} \frac{D(T, S)}{D(T, P)} = - \frac{T}{C_p} \frac{D(P, V)}{D(T, P)} = \frac{T\alpha}{C_p/V}. \end{aligned}$$

Окончательно

$$\Delta T = \frac{T\alpha}{C_p/V} \rho g h \approx 0,1^\circ K,$$

(см. также [21]).

Задача 2. Конденсатор ёмкости C , заполненный диэлектриком, диэлектрическая проницаемость которого зависит от температуры: $\epsilon(T)$, находится в термостате. Конденсатор медленно заряжают до напряжения φ . Найти количество тепла, поглощённое конденсатором в этом процессе.

Решение:

Изменение энергии конденсатора при увеличении заряда на одной из пластин на dq (и уменьшении на столько же — на другой) равно

$$dE = TdS + \varphi dq,$$

где $dQ = TdS$ — теплота, полученная в этом процессе от термостата. Удобно рассматривать процесс зарядки при постоянной температуре. Для этого перейдем к свободной энергии $F = E - TS$,

$$dF = -SdT + \varphi dq. \quad (1)$$

Имея в виду, что $\varphi = q/C(T)$, $C(T) = C_0 \epsilon(T)$, находим

$$\Delta F = F(T, q) - F(T, 0) = \frac{q^2}{2C(T)}. \quad (2)$$

Согласно (1), $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$, так что из (2)

$$\Delta S = S(T, q) - S(T, 0) = -\frac{\partial \Delta F}{\partial T} = -\frac{q^2}{2} \frac{d}{dT} \frac{1}{C(T)} = \frac{q^2}{2C_0} \frac{\varepsilon'(T)}{\varepsilon^2}. \quad (3)$$

Для диэлектрика, составленного из свободно ориентирующихся диполей, очевидно, $\varepsilon'(T) < 0$. (С ростом температуры поляризация разрушается.)

Заметим, что свободно ориентирующийся диполь в электрическом поле \mathcal{E} движется подобно математическому маятнику, частота которого при малых колебаниях пропорциональна \sqrt{g} , в нашем случае $\propto \sqrt{\mathcal{E}}$; при достаточно медленном изменении электрического поля сохраняется адиабатический инвариант, равный отношению энергии колебаний к частоте, так что энергия колебаний $\propto \sqrt{\mathcal{E}}$. Эта энергия колебаний определяет температуру. При увеличении электрического поля энергия колебаний растет. При контакте диполей с частицами термостата избыточная энергия передаётся ему. Таково представление о микроскопической картине процессов, происходящих при зарядке конденсатора.

Возможна и другая картина поляризации. Пусть поляризация диэлектрика обусловлена зарядами, которые при включении электрического поля отклоняются от положений равновесия. Если при нагревании диэлектрика эти заряды могут переходить в более высокое по энергии состояние, в котором их поляризуемость окажется выше, то $\varepsilon'(T) > 0$.

Таким образом, поглощённое конденсатором тепло $Q = T\Delta S$ может быть как положительным, так и отрицательным.

Заметим, наконец, что рассматриваемый процесс изотермической зарядки конденсатора является обратимым: при разрядке конденсатора то же количество тепла выделяется в термостат. Суммарная энтропия конденсатора и термостата не изменяется.

Безусловно, вычисления с использованием термодинамических потенциалов удобнее, чем с использованием „метода циклов“. Тем не менее стоит связать эти методы. Для того, кому метод циклов знаком настолько хорошо, что жалко расставаться с ним, не попрощавшись, приведём пояснения с использованием диаграммы на „ $q\varphi$ “-плоскости. Примем для определённости, что $\varepsilon'(T) < 0$ (рис. 1). Тогда изотерма,

$$\varphi = \frac{q}{C_0 \varepsilon(T)}$$

— это прямая, угол наклона которой растёт с ростом температуры.

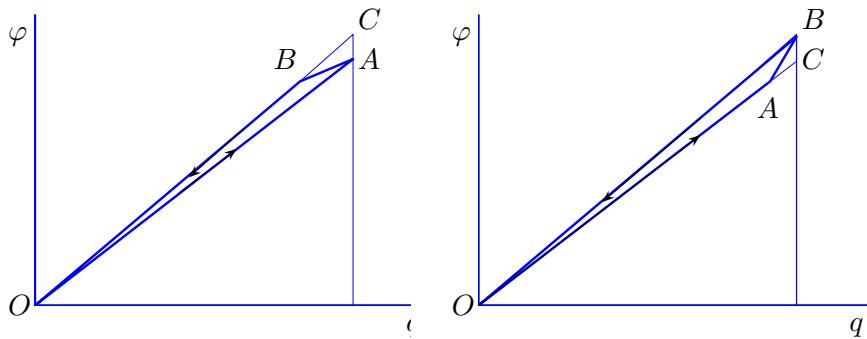


Рис. 1. $OABO$ — цикл Карно с конденсатором в качестве рабочего тела. Работа. $\varepsilon'(T) < 0$

Рис. 2. Цикл Карно при $\varepsilon'(T) > 0$. Контакт с нагревателем при зарядке

Мы используем конденсатор в качестве тепловой машины, заряжая его при одной температуре, а разряжая при другой. Цикл $OABO$ составлен из двух близких изотерм: OA (для температуры T — температуры холодильника) и BO (для температуры $T + dT$ — температуры нагревателя), и адиабаты AB . Направление обхода цикла отличается от направления обхода на PV -диаграмме для газа, так как в формулах, выражающих работу над конденсатором при его зарядке, $\delta A = \varphi dq$, и над газом при изменении его объёма, $\delta A = -PdV$, стоят разные знаки¹. Это цикл Карно. Работа A , совершаемая тепловой машиной за цикл, равна площади, охватываемой циклом на диаграмме. Теплота Q , полученная конденсатором от нагревателя (т. е. на изотерме BO , при разрядке), связана с работой A соотношением

$$\frac{A}{Q} = \frac{dT}{T},$$

определяющим коэффициент полезного действия тепловой машины в цикле Карно. Для вычисления площади, охватываемой циклом Карно, заменим его на цикл $OACO$, более удобный для расчёта. Различие площадей — площадь треугольника ACB — пропорциональная $(dT)^2$, т. е.

¹Мы обычно рассматриваем работу, совершаемую над телом, подобно тому, как это сделано в курсе Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица.

это величина второго порядка малости при $dT \rightarrow 0$, так что ею можно будет пренебречь. Работа при изотермической зарядке конденсатора равна площади под изотермой OA :

$$A_T = \frac{q^2}{2C(T)},$$

работа при изотермической разрядке (на изотерме CO) равна

$$A_{T+dT} = -\frac{q^2}{2C(T+dT)}.$$

Работа в цикле

$$A = A_{T+dT} + A_T = -dT \frac{\partial A}{\partial T}.$$

Интересующая нас теплота, отводимая от конденсатора при его зарядке, совпадает с теплотой, подводимой к нему при его изотермической разрядке на участке BO цикла, $Q = A \frac{T}{dT} = -T \frac{\partial A}{\partial T}$. Разумеется, результат, да и весь ход расчёта, фактически совпадает с приведенным выше расчётом, выполненным с помощью свободной энергии. Очевидно, метод циклов заметно более громоздок. При его использовании требуется постоянно следить за знаками разных слагаемых, за направлениями рассматриваемых процессов и т. п. Например, при $\varepsilon'(T) > 0$ требуются иной рисунок и иные рассуждения (рис.2).

Задача 3. Найти сумму внутренней энергии идеального газа под поршнем в стоящем вертикально цилиндре и потенциальной энергии поршня. Найти теплоёмкость газа под поршнем. Найти теплоёмкость столба атмосферы.

Найти высоту центра тяжести столба атмосферы.

Решение:

$E = Nc_V T + Mgh = Nc_P T$. Так как каждый слой атмосферы находится под постоянным давлением, создаваемым весом слоев, лежащих выше, теплоёмкость атмосферы $C = N_0 c_P$, где N_0 — число молекул во всем столбе атмосферы. Это число может быть выражено через величину атмосферного давления: для столба атмосферы, площадь сечения которого равна единице, $N_0 mg = P_{\text{атм}}$.

Высота центра тяжести столба атмосферы определяется потенциальной энергией молекул, $N_0 mg \langle z \rangle = N_0 c_P T - N_0 c_V T$, откуда $\langle z \rangle = T/mg$.

Подставляя численные значения величин, следует заменить T на $k_B T$ (k_B — постоянная Больцмана). $\langle z \rangle \sim 8$ км.

Сумма внутренней энергии газа под поршнем и потенциальной энергии поршня совпадает с величиной $H = E + PV$ — энталпийей газа. Переход от энергии к энталпии в соотношении $dE = TdS - PdV$ — это преобразование Лежандра: $dH = TdS + VdP$. Используя преобразование Лежандра, можно уйти от неудобной задачи конструирования расширенной системы (вроде той, как в этой задаче).

Задача 4. Частица космических лучей выделила в объёме V энергию E . (Мы рассматриваем небольшой объём и считаем, что в этом объёме энергия распределена равномерно. Выделение энергии можно считать мгновенным.) На сколько изменятся давление и температура в этом объёме? Можно ли использовать это явление для наблюдения космических лучей с помощью акустических датчиков, фиксирующих звуковые волны, приходящие из глубины океана?

Решение:

Изменение температуры $\Delta T = \Delta E/C_V$. Добавочное давление определяется из условия

$$V(P, E) = V(P + \Delta P, E + \Delta E).$$

Разлагая по ΔE , ΔP до первого порядка, получаем

$$\Delta P = - \left(\frac{\partial V}{\partial E} \right)_P / \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_E \Delta E = - \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \frac{\Delta E}{C_V}.$$

В глубине океана $\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = 0$ (как в глубине озера зимой), поэтому звуковые волны (в первом порядке по ΔE) возбуждаться не будут.

Задача 5. Из сосуда откачен воздух. Приоткрыв на короткое время кран, сосуд заполняют атмосферным воздухом. Какой будет температура вошедшего в сосуд воздуха, если теплообмен со стенками сосуда не успевает произойти. Каким будет давление воздуха в сосуде, когда температура его за счет теплообмена сравняется с температурой атмосферного воздуха?

Решение:

$T = \gamma T_0$, $\gamma = c_P/c_V$, $P = P_0/\gamma$, (см. [1, § 43, задача 17], [13, § 22].)

Задача 6. Сравнить теплопроводность шарика, лежащего на столе, с теплопроводностью такого же шарика, подвешенного за верхнюю точку; теплопроводность чрезвычайно жёсткого стержня, растягиваемого данной силой, и того же стержня, сжимаемого такой же силой.

Решение:

Теплоёмкости одинаковы. Подробнее — в дополнении А.

Задача 7. Один раз конденсатор, заполненный диэлектриком, присоединён к источнику напряжения U , а другой раз — заряжен до такого же напряжения, а затем отключён от источника. Найти разность значений теплоёмкости конденсатора в этих двух случаях, $c_q - c_U$.

Решение:

$$\Delta S = \frac{q^2 \varepsilon'(T)}{2C_0 \varepsilon^2} = \frac{C_0 U^2 \varepsilon'(T)}{2}, \quad C = T \frac{\partial \Delta S}{\partial T}$$

$$c_q = T \frac{q^2}{2C_0} \left(\frac{\varepsilon''}{\varepsilon^2} - \frac{2\varepsilon'^2}{\varepsilon^3} \right), \quad C_U = T \frac{C_0 U^2 \varepsilon''}{2}, \quad C_U - c_q = T \frac{q^2 \varepsilon'^2}{C_0 \varepsilon^3}.$$

Задача 8. Конденсатор ёмкости C , заполненный диэлектриком, диэлектрическая проницаемость которого зависит от температуры: $\varepsilon(T)$, заряжают в условиях тепловой изоляции до напряжения U . На сколько изменится температура конденсатора. Принять, что теплоёмкость его велика и практически не зависит от напряжения.

Решение:

В условиях тепловой изоляции неизменной остаётся величина энтропии конденсатора:

$$S(T, U) = S(T_0, 0), \quad (4)$$

где T_0 — исходная температура конденсатора. Согласно равенству (3) из задачи 1.6

$$S(T, U) = S(T, 0) - \frac{C^2(T)U^2}{2} \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{C(T)}. \quad (5)$$

Приведённых равенств достаточно для того, чтобы найти $T(T_0, U)$. Обозначим $T = T_0 + \Delta T$. Учитывая, что изменение температуры ΔT мало, представим $S(T, 0)$ в виде $S(T_0, 0) + \frac{\partial S}{\partial T} \Delta T = S(T_0, 0) + \frac{C}{T_0} \Delta T$, а в малой добавке, зависящей от напряжения, заменим T на T_0 . В итоге

$$\Delta T = -\frac{\delta Q}{C}, \quad (6)$$

где

$$\delta Q = -T_0 \frac{C(T_0)U^2}{2} \frac{\partial}{\partial T_0} \frac{1}{C(T_0)} \quad (7)$$

— тепло, которое было бы подведено к конденсатору при его изотермической зарядке. Обратим внимание на некоторое сходство решённой задачи с задачей об охлаждении кристаллов с парамагнитными примесями методом адиабатического размагничивания (см. задачу 13). Только в этом случае теплоёмкость кристалла не большая, а малая ($C \propto T^3$), поле не электрическое, а магнитное, не включается, а выключается и эффект не малый, а большой.

Задача 9. Заряд q , находящийся на расстоянии l от плоской поверхности диэлектрика, медленно удаляется на бесконечность. Какое количество тепла выделится при этом в диэлектрике, если его температура поддерживается постоянной?

Задача 10. Конденсатор заполнен диэлектриком, диэлектрическая проницаемость которого $\varepsilon = 1 + A/T$. Найти энергию конденсатора, заряженного до напряжения U .

Решение:

Энергия конденсатора $E = \frac{1}{2}C_0U^2$, где C_0 — ёмкость конденсатора без диэлектрика.

Задача 11. Тонкая диэлектрическая пластина находится в большом плоском конденсаторе. Конденсатор медленно заряжают, так что в нём возникает электрическое поле \mathcal{E} . На сколько изменится температура пластины, если считать её теплоизолированной? Диэлектрическая проницаемость пластины равна $\varepsilon(T)$, теплоёмкость в расчёте на единицу объёма — C . Изменение температуры можно считать малым. Рассмотреть случаи, когда пластина расположена параллельно пластинам и перпендикулярно им.

Решение:

В том случае, когда пластина расположена параллельно пластинам конденсатора (т.е. перпендикулярно силовым линиям), напряжённость электрического поля в конденсаторе \mathbf{E}_0 совпадает с индукцией поля \mathbf{D} внутри пластины. Если заряжать конденсатор при постоянной температуре, то свободная энергия, локализованная внутри пластины, вырастет на величину $\Delta F =$

$$= \frac{V}{4\pi} \int_0^D EdD = \frac{VE_0^2}{8\pi\varepsilon(T)}, \text{ (здесь } V \text{ — объём пластины). Прирост энтропии}$$

при этом $\Delta S = S(T, E_0) - S(T, 0) = -\frac{\partial \Delta F}{\partial T} = \frac{V\varepsilon'(T)E_0^2}{8\pi\varepsilon^2}$. Пластина поглотит из термостата теплоту $Q_T = T\Delta S$.

Если же пластина теплоизолирована, то $S(T, 0) = S(T + \delta T, E_0)$, откуда $\delta T \approx -Q_T/C$, где C — теплоёмкость пластины.

В случае, когда пластина расположена параллельно силовым линиям, напряжённость электрического поля в конденсаторе \mathbf{E}_0 совпадает с напряжённостью электрического поля \mathbf{E} внутри пластины. В этом случае удобно воспользоваться потенциалом

$$\Phi = F - \frac{V}{4\pi}ED, \text{ для которого } d\Phi = -SdT - \frac{V}{4\pi}DdE. \text{ Теперь } \Delta\Phi = \Phi(T, E) - \Phi(T, 0) = -\frac{V\varepsilon(T)E_0^2}{8\pi}. \text{ Прирост энтропии при этом } \Delta S = \frac{\partial\Delta\Phi}{\partial T} = \frac{V}{8\pi}\varepsilon'(T)E_0^2.$$

Обратим внимание, что прирост энтропии больше, чем для пластины, расположенной перпендикулярно силовым линиям, так как во втором случае поле внутри пластины не экранируется при поляризации диэлектрика.

Заметим также, что добавочная свободная энергия

$\Delta F = \frac{V\varepsilon(T)}{8\pi}E_0^2$, локализованная внутри пластины, больше, чем в отсутствие пластины. Это могло бы привести к ошибочному заключению о выталкивании пластины из области, где есть электрическое поле. Однако при наличии пластины, расположенной вдоль силовых линий электрического поля, весьма существенно изменяется также энергия поля вне её.

Задача 12. Диэлектрический шар находится в большом плоском конденсаторе. Конденсатор медленно заряжают, так что в нём возникает электрическое поле \mathcal{E} . На сколько изменится температура шара, если считать его теплоизолированным? Диэлектрическая проницаемость шара равна $\varepsilon(T)$, теплоёмкость в расчёте на единицу объёма — \mathcal{C} . Изменение температуры можно считать малым. (См. [2, § 11].)

Решение:

Эту задачу можно рассматривать как иллюстрацию к материалу, изложенному в [2, § 11].

Воспользуемся полной свободной энергией \mathcal{F} , из которой исключена энергия поля, которое существовало бы во всём пространстве в отсутствие тела. Так как внешнее поле \mathcal{E} однородно,

$$d\mathcal{F} = -\mathcal{S}dT - \mathcal{P}d\mathcal{E}, \quad (8)$$

где \mathcal{S} — энтропия шара, \mathcal{P} — его дипольный момент. Дипольный момент выражаем через объём шара V и его поляризацию \mathbf{P} , которая выражается через электрическое поле \mathbf{E} внутри шара, а оно — через внешнее

поле вдали от шара (поле в конденсаторе):

$$\mathcal{P} = V\mathbf{P}, \quad \mathbf{P} = \frac{\varepsilon - 1}{4\pi}\mathbf{E}, \quad \mathbf{E} = \frac{3}{2 + \varepsilon}\mathcal{E}.$$

(см., например, [2, § 8]). Дальнейший ход решения задачи вполне аналогичен пути решения задачи 8.

$$\Delta\mathcal{F} = \mathcal{F}(T, \mathcal{E}) - \mathcal{F}(T, 0) = \frac{3V\mathcal{E}^2}{8\pi} \frac{1-\varepsilon}{2+\varepsilon} = \frac{3V\mathcal{E}^2}{8\pi} \left(\frac{3}{2+\varepsilon} - 1 \right),$$

$$\Delta\mathcal{S} = - \left(\frac{\partial \Delta\mathcal{F}}{\partial T} \right)_\varepsilon = \frac{9V\mathcal{E}^2}{8\pi} \frac{\varepsilon'(T)}{(2+\varepsilon)^2}, \quad \delta T = - \frac{T\Delta\mathcal{S}}{VC}.$$

Подчеркнём, что в равенстве (8) работа $-\mathcal{P}d\varepsilon$ содержит не то значение электрического поля, которое имеется около шара или внутри него, а поле вдали от шара, т. е. то, которое было бы в отсутствие шара. Фактически свободная энергия \mathcal{F} учитывает вклад в свободную энергию полей в пространстве, окружающем шар.

2. Микроканоническое распределение

Задача 13. Рассмотрим способ получения низких температур, называемый адиабатическим размагничиванием. Парамагнитная соль редкоземельного элемента охлаждается с помощью жидкого гелия до температуры $T_0 \sim 1^0 K$. Найти как будет изменяться энтропия при включении магнитного поля при постоянной температуре. Затем система теплоизолируется и магнитное поле выключают. Найти конечную температуру системы, если начальное магнитное поле $H_0 = 10^4$ Гс, а конечное поле, создаваемое собственными магнитными моментами, $H_f = 10^2$ Гс. [33]

Решение:

Обозначим через N_+ число магнитных моментов направленных по магнитному полю, а N_- – против. Статистический вес Γ данного макро состояния есть

$$\Gamma = \frac{N!}{N_+! N_-!} \quad (9)$$

Введем величину m , определяемую соотношением

$$2m = N_+ - N_- \quad (10)$$

Энтропия данного макросостояния $S = \ln \Gamma$ как функция m имеет максимум при $m = 0$. Вблизи максимума мы можем записать

$$\ln \Gamma(m, N) \approx \ln \Gamma(0, N) + \frac{m^2}{2} \frac{\partial^2 \ln \Gamma}{\partial m^2} = \ln \Gamma(0, N) - \frac{2m^2}{N}, \quad (11)$$

где величины m, N_+, N_- рассматриваются как непрерывные переменные и использовано приближенное равенство $(\partial/\partial M) \ln M! \approx \ln M$. Энергия E системы магнитных моментов μ во внешнем поле H есть $E = -2m\mu H$. Тогда энтропию можно представить в виде

$$S = S_0 - \frac{2m^2}{N} = S_0 - \frac{E^2}{2\mu^2 H^2 N}. \quad (12)$$

Используя определение температуры

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = -\frac{E}{\mu^2 H^2 N} \quad (13)$$

получим $E = -\mu^2 H^2 N/T$, так что

$$S = S_0 - \frac{\mu^2 H^2 N}{2T^2} \quad (14)$$

Видно, что при увеличении магнитного поля энтропия уменьшается и значит система отдает тепло термостату. После достижения большого значения магнитного поля систему теплоизолируют и адиабатически выключают магнитное поле. При $S = Const$ конечная температура T_f системы определяется (если пренебречь изменением S_0) из

$$T_f = T_0 \frac{H_f}{H} \sim 10^{-2} \text{ } ^0K, \quad (15)$$

где H_f конечное значение магнитного поля, определяемое внутренними магнитными полями.

Задача 14. а) Цепочка состоит из N звеньев длины a . Каждое звено может свободно поворачиваться, ориентируясь по или против оси x , направленной вверх. Верхний конец цепочки закреплён, к нижнему — подвешен груз веса f . Найти зависимость среднего значения длины цепочки от температуры.

Это примитивная модель молекулы каучука. Она „улавливает“ необычную зависимость длины молекул от температуры (при достаточно больших значениях величины af).²

б) Резинка длины l , на которой подвешен груз f , при нагревании укорачивается: $\left(\frac{\partial l}{\partial T}\right)_f < 0$. Как изменится её температура при адабатическом растягивании?

Решение:

[9, гл. 1, задача 13].³ Пусть число сегментов, направленных вниз, равно $N_+ = N/2 + m$, а вверх $N_- = N/2 - m$. Тогда длина цепи равна $l = 2ma$. В качестве энергии цепочки принимаем потенциальную энергию груза

$$E = -lf = -2maf.$$

(За начало отсчета принят уровень точки подвеса. В рассматриваемой модели молекулы кинетическая энергия теплового движения звеньев не учитывается.) Энтропия состояния с заданной длиной

$$S = \ln C_N^{N_+} = \ln \frac{N!}{N_+! N_-!}.$$

Связь температуры с энергией

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{-2af} \frac{\partial S}{\partial m} = \frac{1}{2af} \ln \frac{N_-}{N_+},$$

откуда

$$\frac{N - 2m}{N + 2m} = e^{-2maf/T}, \quad m = \frac{N}{2} \operatorname{th} \frac{af}{T}, \quad l = Na \operatorname{th} \frac{af}{T}.$$

С ростом температуры длина цепочки убывает. Для резины этому отвечает условие

$$\left(\frac{\partial l}{\partial T}\right)_f < 0. \quad (16)$$

²Кинетическую энергию теплового движения звеньев цепочки следует отнести к термостату, так что длина цепочки связана с её энергией — потенциальной энергией груза — соотношением $E = -lf$. Наша задача — выразить среднюю величину $E = -lf$ через температуру.

Получаемое уравнение состояния $l(f, T)$ будет моделировать уравнение состояния каучука при не слишком малых значениях длины l .

³ Решение этой задачи с использованием микроканонического распределения не проще, чем с использованием канонического, но именно такой подход к задачам мы хотим проиллюстрировать.

С точки зрения формальных вычислений, эта задача не отличается от задач о двухуровневой системе, о намагничивании газа магнитных диполей со спином $1/2$.

б) Изменение температуры резинки при адиабатическом изменении длины характеризуется термодинамическим коэффициентом

$$\left(\frac{\partial T}{\partial l} \right)_S .$$

Преобразуем его, используя соотношение $\frac{\partial(T, S)}{\partial(f, l)} = -1$.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial T}{\partial l} \right)_S &= \frac{\partial(T, S)}{\partial(l, S)} = - \frac{\partial(f, l)}{\partial(f, T)} \frac{\partial(f, T)}{\partial(l, T)} \frac{\partial(l, T)}{\partial(l, S)} = \\ &= - \left(\frac{\partial l}{\partial T} \right)_f \left(\frac{\partial f}{\partial l} \right)_T \frac{T}{C_l}. \end{aligned}$$

Поскольку для каучука, очевидно,

$$C_l > 0, \quad \left(\frac{\partial l}{\partial f} \right)_T > 0, \quad (17)$$

с учётом неравенства (16) получаем $\left(\frac{\partial T}{\partial l} \right)_S > 0$: при растягивании резины она нагревается. В части курса, посвященной фазовым переходам и флуктуациям, будет показано, что неравенства вида (17) являются необходимыми условиями термодинамического равновесия для любого вещества.

Задача 15. Найти модуль Юнга резины, рассматривая модель спицых между собой идеальных полимерных цепей, плотность цепей — ν .

Решение:

Рассмотрим сначала предельно упрощенную одномерную модель полимерной цепи из N сегментов длины a , каждый может быть ориентирован в вертикальном направлении. Найдем энтропию цепи при фиксированной полной длине. Пусть число сегментов направленных вниз равно $N_+ = N/2 + m$, а вверх $N_- = N/2 - m$. Тогда длина цепи равна $l = 2ma$, а ее энтропия

$$S = S_0 - \frac{2m^2}{N} = S_0 - \frac{l^2}{2Na^2} \quad (18)$$

Если полимерная цепь растягивается при постоянной температуре T силой f , то мы имеем связь

$$f = \left(\frac{\partial F}{\partial l} \right)_T, \quad (19)$$

где $F = E - TS$ – свободная энергия. Если можно пренебречь зависимостью упругой энергии цепи E от ориентации сегментов, то мы получим

$$f = -T \left(\frac{\partial S}{\partial l} \right)_T = \frac{Tl}{Na^2} \quad (20)$$

Из этого выражения следует, что при постоянной силе длина цепи уменьшается при нагревании.

Обобщим нашу модель на трехмерный случай. Рассмотрим цепь в трехмерном пространстве, помещенную на кубическую решетку. Наличие решетки не будет заметно сказываться на макроскопических характеристиках цепи, и в то же время позволяет легко получить выражение для энтропии цепи простой заменой $N \rightarrow N/3$ и $l^2 \rightarrow r^2$ в выражении для одномерной модели

$$S = S_0 - \frac{3r^2}{2Na^2} \quad (21)$$

Вероятность $p(r)$, что расстояние между концами цепи есть r определяется

$$p(r) \propto \exp(S) \propto \exp\left(-\frac{3r^2}{2Na^2}\right), \quad (22)$$

тогда среднее расстояние между концами цепи находится из

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\int_0^\infty r^2 \exp(-\alpha r^2) d^3r}{\int_0^\infty \exp(-\alpha r^2) d^3r} = -\frac{d}{d\alpha} \ln \left(\int_0^\infty \exp(-\alpha r^2) d^3r \right) = \frac{3}{2\alpha} = Na^2, \quad (23)$$

где использовано обозначение $\alpha \equiv 3/2Na^2$. Представим теперь плотноупакованную смесь таких полимерных цепей (например, каучук), и между звеньями различных цепей созданы "сшивки" (для этого надо к каучуку добавить серу и подогреть). Получится трехмерная сеть, называемая гелем, известная больше как резина. Свободная энергия геля есть

$$F = E - T\bar{S} = F_0 - T\nu V \left\langle \frac{3r^2}{2Na^2} \right\rangle, \quad (24)$$

где ν – число цепей в единице объема. Рассмотрим однородную деформацию образца резины в виде параллелепипеда с размерами L_x, L_y, L_z , в результате которой его размера станут $L'_x = \lambda_x L_x, L'_y = \lambda_y L_y, L'_z = \lambda_z L_z$. В среднем деформации размеров отдельных цепей будут такими же. Если учесть, что при деформации цепей их взаимодействие со своим окружением не меняется, т.е. энергия цепей остается неизменной, то изменение свободной энергии определяется лишь изменением энтропии цепей и равно

$$\Delta F = -T\Delta\bar{S} = T\nu V \left\langle \frac{3(r^2/3)}{2Na^2} \right\rangle [(\lambda_x^2 - 1) + (\lambda_y^2 - 1) + (\lambda_z^2 - 1)] \quad (25)$$

При однородном растяжении вдоль оси x , пренебрегая малым изменением объема образца при не сильно больших деформациях, имеем $\lambda_x \equiv \lambda, \lambda_y = \lambda_z = \lambda^{-1/2}$. тогда соотношение между растягивающей силой, отнесенной к единице площади, и относительной деформацией $\lambda - 1$ находится из

$$\frac{f_x}{L_y L_z} = \frac{1}{L_y L_z} \frac{\partial F}{\partial(\lambda L_x)} = \frac{T\nu V}{2L_x L_y L_z} \left[2\lambda - \frac{2}{\lambda^2} \right] = T\nu \left(\lambda - \frac{1}{\lambda^2} \right) \quad (26)$$

Для малых относительных деформаций $\lambda - 1 \ll 1$ это соотношение принимает вид закона Гука

$$\frac{f_x}{L_y L_z} = 3T\nu(\lambda - 1), \quad (27)$$

откуда получаем простое выражение для модуля Юнга

$$Y = 3T\nu. \quad (28)$$

Задача 16. Вычислить среднюю энергию и теплоемкость системы из N осцилляторов с помощью микроканонического распределения. [9]

Решение:

Пусть система имеет полную энергию $E = L\hbar\omega$, которую можно распределить между N осцилляторами Γ способами, где

$$\Gamma = \frac{(N - 1 + L)!}{(N - 1)!L!} \approx \frac{(N + L)!}{N!L!} \quad (29)$$

определяется как число различных перестановок $N - 1 + L$ объектов, из которых $N - 1$ - перегородки N ящиков, а L - число квантов энергии. [47]

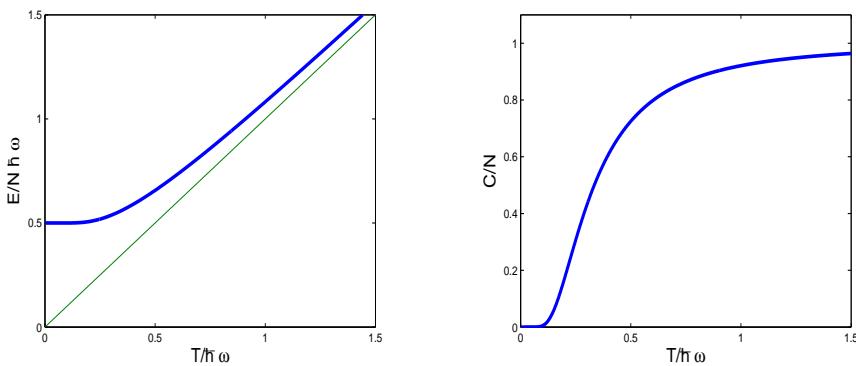


Рис. 3. Средняя энергия и теплоемкость в расчете на один осциллятор.

Энтропия системы есть $S = \ln \Gamma$, а температура определяется из соотношения

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{\hbar\omega} \frac{\partial S}{\partial L} = \frac{1}{\hbar\omega} \ln \left(\frac{N+L}{L} \right) \quad (30)$$

откуда

$$E = \hbar\omega L = \frac{N\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/T) - 1} \quad (31)$$

При высоких температурах $\hbar\omega \ll T$

$$E \approx NT, \quad C = N, \quad (32)$$

при низких температурах $\hbar\omega \gg T$

$$E \approx N\hbar\omega \exp(-\hbar\omega/T), \quad C = N \left(\frac{\hbar\omega}{T} \right)^2 \exp(-\hbar\omega/T) \ll N, \quad (33)$$

рис. 3.

Задача 17. Шары на плоском бильярде. На плоском (т.е. двумерном) бильярде находятся N шаров, которые упруго сталкиваются между собой и с бортами. Полная энергия шаров равна E_0 . Найти функцию распределения по энергии для одного шара. Рассмотреть предельный случай $N \rightarrow \infty$, $E/N = Const$.

Решение:

Вероятности найти шары в элементе фазового объема $d^2p_1 d^2r_1 \dots d^2p_N d^2r_N$

есть

$$Pd^2p_1d^2r_1...d^2p_Nd^2r_N = A\delta(E_0 - \varepsilon_1 - ... - \varepsilon_N)d^2p_1d^2r_1...d^2p_Nd^2r_N, \quad (34)$$

где A и далее B, C – нормировочные константы. Замечая, что для двумерного случая

$$dp_xdp_y = 2\pi pdp = 2\pi md\varepsilon, \quad p = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}, \quad (35)$$

можно найти функцию распределения по энергиям F , проинтегрировав P по пространственным координатам

$$F(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_N)d\varepsilon_1...d\varepsilon_N = B\delta(E_0 - \varepsilon_1 - \dots - \varepsilon_N)d\varepsilon_1...d\varepsilon_N \quad (36)$$

Функция распределения по энергиям для одного шара $w(\varepsilon_1)$ находится интегрированием функции F по энергиям $N - 1$ частиц

$$w(\varepsilon_1) = B \int \dots \int \delta(E_0 - \varepsilon_1 - \dots - \varepsilon_N)d\varepsilon_2...d\varepsilon_N \quad (37)$$

После замены переменных $\varepsilon_i = x_i(E_0 - \varepsilon_1)$ выражение для функции распределения w принимает вид

$$w(\varepsilon_1) = B(E_0 - \varepsilon_1)^{N-2} \int \dots \int \delta(1 - x_2 - \dots - x_N)dx_2...dx_N = C(E_0 - \varepsilon_1)^{N-2} \quad (38)$$

Нормировочная константа C находится из условия

$$\int w(\varepsilon_1)d\varepsilon_1 = C \int (E_0 - \varepsilon_1)^{N-2}d\varepsilon_1 = C \frac{E_0^{N-1}}{N-1} = 1 \quad (39)$$

откуда

$$w(\varepsilon_1) = \frac{N-1}{E_0} \left(1 - \frac{\varepsilon_1}{E_0}\right)^{N-2} \quad (40)$$

Для фиксированной средней энергии, приходящейся на одну частицу $E_0/N = Const \equiv T$ при $N \rightarrow \infty$ распределение по энергии переходит в больцмановское

$$w(\varepsilon_1) \sim \left(1 - \frac{\varepsilon_1}{N(E_0/N)}\right)^N \rightarrow e^{-\varepsilon/T}, \quad (41)$$

т.е. температурой T является в данном случае средняя энергия, приходящаяся на одну частицу. В соответствии с определением температуру системы можно найти, если учесть, что интеграл по всем энергиям N частиц дает зависимость статвеса от полной энергии E_0 , т.е. $\Gamma(E_0) \sim E_0^{N-1}$. Тогда энтропия равна

$$S = \ln \Gamma = (N - 1) \ln E_0 + Const, \quad (42)$$

а температура при $N \rightarrow \infty$

$$\frac{1}{T} = \frac{dS}{dE_0} = \frac{N}{E_0} \quad (43)$$

в соответствии с приведенным выше определением.

На рис.4 приведена функция распределения для числа шаров $N = 2, 3, 5$ и $N \rightarrow \infty$.

Задача 18. N шаров движутся на плоском билльярде, испытывая упругие столкновения друг с другом и со стенками. Определить распределение шаров по компоненте скорости v_x . Принять, что для замкнутой системы шаров справедливо микроканоническое распределение. (В этой задаче подразумевается, что билльярд „реализован“ на компьютере.)

Решение:

Распределение по импульсам для системы N шаров

$$dw = A\delta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \dots + \varepsilon_N - E)d^2p_1d^2p_2\dots d^2p_N,$$

где $\varepsilon_i = \frac{p_i^2}{2m}$, E — полная энергия системы шаров, A — нормировочная константа. Чтобы получить распределение по компоненте скорости v_x одного шара (например, первого), следует проинтегрировать dw по всем компонентам импульсов, кроме dp_{1x} . При этом учтем, что $d^2p_i \propto d\varepsilon_i$, а также сделаем замены переменных

$$\varepsilon_i = (E - mv_{1x}^2/2)z_i, \quad i = 2, 3, \dots, N, \quad v_{1y} = \sqrt{(E - mv_{1x}^2/2)/m} z_{1y},$$

позволяющие привести интеграл к безразмерному виду (и тем самым уйти от его фактического вычисления)

$$dw = A' \int \delta((E - mv_{1x}^2/2)(z_{1y} + z_2 + z_3 + \dots + z_N - 1)) \cdot \\ \cdot dz_{1y}dz_2\dots dz_N (E - mv_{1x}^2/2)^{N-1/2} = A''(E - mv_{1x}^2/2)^{N-3/2}.$$

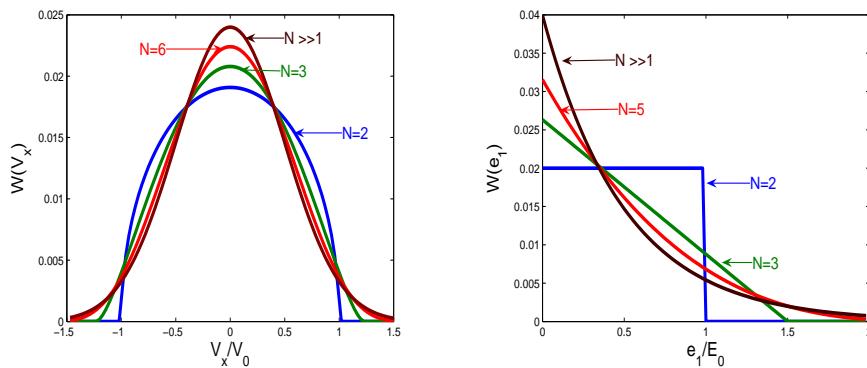


Рис. 4. Функции распределения по скорости и энергии для различного числа шаров.

В итоге,

$$\frac{dw}{dv_x} = B \left(1 - \frac{mv_{1x}^2}{2E} \right)^{N-3/2}.$$

Из условия нормировки, $\int dw = 1$, может быть найдена и постоянная $B = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{E}} \frac{(2N-4)!!}{(2N-3)!!}$.

На рис.4 приведены функции распределения для числа шаров $N = 2, 3, 6$ и $N \rightarrow \infty$, где $V_0 = \sqrt{2E/m}$.

Задача 19. N „компьютерных“ шаров движутся на наклонном плоском биллиарде, испытывая упругие столкновения друг с другом и с бортиками. Определить распределение шаров по „высоте“ (полагая, что верхнего бортика шары не достигают).

Задача 20. N шаров движутся в трехмерном бильярде, испытывая упругие столкновения друг с другом и со стенками. Определить распределение шаров по компоненте скорости v_x . Принять, что для замкнутой системы шаров справедливо микроканоническое распределение.

3. Каноническое распределение

Задача 21. Найти число квантовых состояний частицы между стенками $0 \leq x \leq L$ с энергиями в интервале от ε до $\varepsilon + d\varepsilon$. Рассмотреть

случаи, когда стенки непроницаемы и когда выполняются циклические граничные условия. (Одномерная задача).

То же для частицы в кубе с ребром L .

Решение:

В одномерной задаче волновые функции и уровни энергии частицы

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_n x, \quad k_n = \frac{\pi n}{L}, \quad n = 1, 2, \dots,$$

$$\varepsilon_n = \frac{p_n^2}{2m}, \quad p_n = \hbar k_n = \frac{\hbar \pi n}{L}.$$

В шкале импульсов уровни энергии распределены равномерно, в интервале dp находится $dn = \frac{Ldp}{\pi\hbar}$ уровней. Учитывая, что

$$p = \sqrt{2m\varepsilon}, \quad dp = \sqrt{\frac{m}{\varepsilon}} d\varepsilon, \quad \text{получаем } dn = \frac{Ld\varepsilon}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{m}{\varepsilon}}.$$

Переходя к трёхмерной задаче, будем считать, что частица движется в кубе со стороной L . В уравнении Шредингера переменные x, y, z разделяются. Собственным значениям энергии в пространстве импульсов отвечают точки, координаты которых распределены вдоль каждой из осей (p_x, p_y, p_z) с постоянным шагом $L/(\pi\hbar)$ (точнее, вдоль каждой из полуосей $p_{x,y,z} > 0$). Каждому из состояний в импульсном пространстве соответствует объём $(\pi\hbar/L)^3$. Объёму d^3p в импульсном пространстве отвечает $dn = d^3p/(\pi\hbar/L)^3$ состояний. Здесь подразумевается, что объём в импульсном пространстве d^3p достаточно велик, чтобы оказалось $dn \gg 1$. Это обеспечивается макроскопическим значением величины $V = L^3$. При соединении нескольких объёмов V_1, V_2, \dots число состояний растет пропорционально их сумме. Очень часто можно бывает также рассматривать в качестве объёма V малый (с других точек зрения) объём dV , не нарушая условия $dn \gg 1$. Чтобы перейти к интервалу энергии $d\varepsilon$, заменим d^3p на $p^2 dp d\Omega_p = \sqrt{2m^3\varepsilon} d\varepsilon (4\pi/8)$. В итоге

$$dn = L^3 \sqrt{2m^3\varepsilon} d\varepsilon / (2\pi^2\hbar^3).$$

Этот же результат можно получить, если принять для волновых функций циклические граничные условия:

$$\psi(0) = \psi(L), \quad \psi'(0) = \psi'(L).$$

Тогда

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_n x}, \quad k_n = \frac{2\pi n}{L}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

(и аналогично — для движений в направлениях y и z .) Состояния в шкале импульсов расположены вдвое реже, но каждому значению энергии (кроме основного) соответствует два значения импульса, отличающихся знаком. В таком случае направление импульса может лежать в любом квадранте, а размер ячейки в импульсном пространстве, отвечающей одному квантовому состоянию частицы, $(2\pi\hbar/L)^3$, в 8 раз больше.

Заметим, наконец, что число состояний частицы в периодическом поле (в одномерной задаче) или в поле кристаллической решётки выражается подобным же образом, но с заменой импульса на квазимпульс.

Задача 22. Два различных идеальных газа, находившиеся в объёмах V_1 и V_2 , имели одинаковые температуры и давления и были разделены перегородкой. Перегородку убирают, и газы смешиваются (путем диффузии), равномерно заполняя весь объем $V_1 + V_2$. На сколько изменится суммарная энтропия газов? Числа частиц в указанных объёмах были равны N_1 и N_2 .

Решение:

Первоначальное значение энтропии равно

$$S_{\text{H}} = S_1 + S_2, \quad S_i = N_i \ln \left[\frac{V_i}{N_i} \right] + N_i f(m_i, T), \quad i = 1, 2, \quad (44)$$

где функция f включает в себя величины, независящие от плотности N_i/V_i . После смешивания каждый из газов находится в объеме $V = V_1 + V_2$ и энтропия равна

$$S_{\text{K}} = S_1 + S_2, \quad S_i = N_i \ln \left[\frac{V_1 + V_2}{N_i} \right] + N_i f(m_i, T), \quad i = 1, 2 \quad (45)$$

Тогда изменение энтропии равно

$$\Delta S = N_1 \ln \left[\frac{V_1 + V_2}{V_1} \right] + N_2 \ln \left[\frac{V_1 + V_2}{V_2} \right] > 0 \quad (46)$$

Если бы газы состояли из тождественных частиц, то очевидно, что изменение энтропии было бы равно нулю. Приведем также формальное доказательство:

$$\Delta S = N_1 \ln \left[\frac{(V_1 + V_2)N_1}{V_1(N_1 + N_2)} \right] + N_2 \ln \left[\frac{(V_1 + V_2)N_2}{V_2(N_1 + N_2)} \right] = 0, \quad (47)$$

поскольку равны температура и давление газов, а следовательно и их плотность.

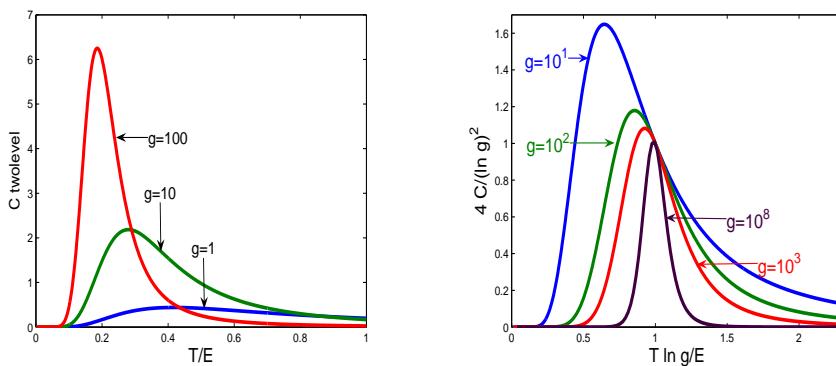


Рис. 5. Теплоемкость двухуровневой системы для высоких степеней вырожденности верхнего уровня $g = 10 - 10^8$.

Тот факт, что переходе от газов, молекулы которых различаются как угодно мало, к газам с тождественными молекулами энтропия смешения изменяется скачком, составляет содержание *парадокса Гиббса*.

Задача 23. Найти теплоемкость двухуровневой системы, причем верхний уровень имеет очень высокую степень вырождения g , так что даже $\ln g \gg 1$.

Решение:

([8, § 44]). Разумеется, речь идет о совокупности очень большого числа таких систем, требуется же определить теплоёмкость в расчете на одну систему. Переход к такой совокупности и возврат к одной системе мы оставим за рамками вычислений. Энергию и теплоёмкость в расчете на одну систему мы обозначаем в данном случае E и C .

Приняв за начало отсчета энергию основного уровня и обозначив энергию верхнего уровня ε , получаем выражение для статсуммы одной двухуровневой системы

$$Z = 1 + ge^{-\varepsilon/T}.$$

Средняя энергия

$$\langle E \rangle \equiv E = -\frac{d \ln Z}{d(1/T)} = \frac{\varepsilon g e^{-\varepsilon/T}}{1 + g e^{-\varepsilon/T}} = \frac{\varepsilon}{\frac{1}{g} e^{\varepsilon/T} + 1}.$$

При $T \ll \varepsilon$ энергия $E \approx 0$, при $T \gg \varepsilon$ энергия $E \approx \varepsilon$. Обозначим $x = (1/g)e^{\varepsilon/T}$. Значение $E = \varepsilon/2$ достигается при $x(T) = 1$. Можно ожидать,

что при таком примерно значении температуры окажется максимальной и теплоёмкость $C = dE/dT$. Теплоёмкость

$$C = \left(\frac{\varepsilon}{T}\right)^2 \frac{\frac{1}{g}e^{\varepsilon/T}}{\left(\frac{1}{g}e^{\varepsilon/T} + 1\right)^2} = \frac{(\varepsilon/T)^2}{(\sqrt{x} + 1/\sqrt{x})^2}.$$

При $T \ll \varepsilon$ экспоненциальная функция $x(T)$ меняется гораздо быстрее⁴ чем $(\varepsilon/T)^2$, и можно найти приближенное положение максимума теплоёмкости T_0 , находя значение x , при котором достигается минимум знаменателя. Это значение, как мы и ожидали, $x = 1$, откуда $\varepsilon/T_0 \approx \ln g$. Таким образом, температура, при которой теплоёмкость достигает максимума приближенно равна

$$T_0 \approx \frac{\varepsilon}{\ln g} \ll \varepsilon,$$

а значение теплоёмкости в максимуме

$$C(T_0) \approx \frac{(\ln g)^2}{4} \gg 1.$$

Ширина ΔT пика теплоёмкости можно оценить из условия

$$E(T \rightarrow \infty) = \int_0^\infty C dT \approx \Delta T C(T_0) \approx \varepsilon,$$

откуда

$$\Delta T \approx \frac{4\varepsilon}{(\ln g)^2} = \frac{4T_0}{\ln g} \ll T_0.$$

Таким образом, максимум теплоёмкости смещается в сторону более низких температур, а ширина пика сужается (рис. 5), слева. Справа показана теплоемкость в приведенных единицах; видно, что при увеличении g используемое приближение работает хорошо.

Задача 24. Газ состоит из молекул, которые имеют определенный дипольный момент и могут произвольным образом ориентироваться в пространстве. Найти диэлектрическую проницаемость газа в пределе высоких температур.

⁴ При $T \ll \varepsilon$, $x \approx 1$ имеем $|\frac{d}{dT} \frac{\varepsilon^2}{T^2}| / |\frac{dx}{dT}| = \frac{2T}{\varepsilon} x \ll 1$.

Решение:

Для изотропного диэлектрика диэлектрическая проницаемость ϵ находится из соотношения

$$\epsilon = 1 + \frac{4\pi|\mathbf{P}|}{|\mathbf{E}|},$$

где \mathbf{P} есть вектор дипольного момента единицы объема, наведенный приложенным внешним электрическим полем \mathbf{E} , ($Ed \ll T$ для не очень низких температур)

$$\mathbf{P} = n\langle \mathbf{d} \rangle = n \frac{\int d\mathbf{e}^{d\mathbf{E}/T} d\Omega}{\int e^{d\mathbf{E}/T} d\Omega} \approx n \frac{\int d(1 + d\mathbf{E}/T + ...) d\Omega}{\int (1 + d\mathbf{E}/T + ...) d\Omega} = \frac{nd^2\mathbf{E}}{3T},$$

где n – концентрация молекул, \mathbf{d} – дипольный момент молекулы, $d\Omega$ – элемент телесного угла вдоль направления дипольного момента молекулы. При вычислении интеграла использовано, что $\langle \mathbf{d} \rangle = 0$, $\langle d_i d_j \rangle = \delta_{ij} d^2 / 3$. Таким образом, диэлектрическая проницаемость газа молекул, обладающих собственным дипольным моментом, равна

$$\epsilon = 1 + \frac{4\pi n d^2}{3T}.$$

Задача 25. Найти теплоемкость классического Больцмановского газа, заключенного в ящик высотой L при температуре T в поле тяжести. [46]

Решение:

Энергия частицы есть

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} + mgz, \quad (48)$$

поэтому статсумма Z факторизуется на два сомножителя, один из которых получается интегрированием по импульсам, а другой — по координатам, $Z = Z_1 Z_2$, так что средняя энергия равна

$$\begin{aligned} \bar{E} &= -\frac{d}{d\beta} \ln Z_1 - \frac{d}{d\beta} \ln Z_2 = \\ &= -\frac{d}{d\beta} \ln \left(\int e^{-\beta p^2/2m} d^3 p \right) - \frac{d}{d\beta} \ln \left(\int e^{-\beta mgz} d^3 r \right) \end{aligned} \quad (49)$$

Вычисляя интегралы и дифференцируя, получим

$$\bar{E} = \frac{3T}{2} + \left(T - \frac{mgL}{\exp(mgL/T) - 1} \right) \quad (50)$$

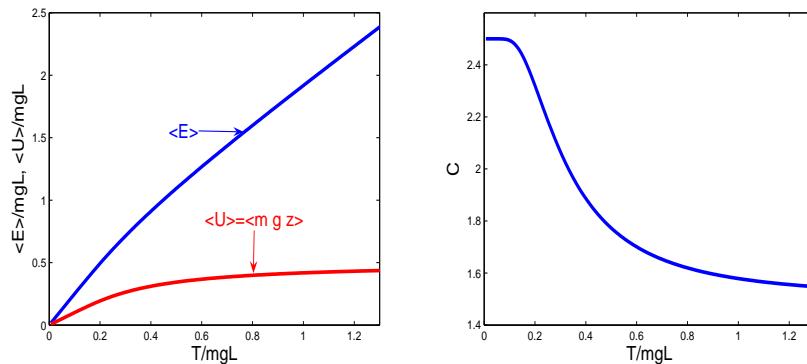


Рис. 6. Средние полная и потенциальная энергии (слева) и теплоемкость (справа) больцмановского газа в поле тяжести.

Для низких температур $T \ll mgL$

$$\bar{E} \approx \frac{3T}{2} + T = \frac{5T}{2}, \quad (51)$$

для высоких температур

$$\bar{E} \approx \frac{3T}{2} + (T - T) = \frac{3T}{2}. \quad (52)$$

Задача 26. Найти форму энергетического спектра электронов при β -распаде атомного ядра (${}^A_Z \rightarrow {}^A_{Z+1} + e + \bar{\nu}$), считая, что все квантовые состояния системы электрон+антинейтрино при заданной их суммарной энергии ($\varepsilon_e + \varepsilon_{\bar{\nu}} = E$) равновероятны⁵. Энергией отдачи ядра можно пренебречь.

Решение:

Ответ: $dN_e \propto \sqrt{\varepsilon_e}(E - \varepsilon_e)^2 d\varepsilon_e$ (при $m_{\bar{\nu}} = 0$, $\varepsilon_e \ll m_e c^2$).

Задача 27. Газ находится в объёме V , в малой части которого V_1 имеется „потенциальная яма“ глубины $-U_0$. Найти теплоёмкость газа.

⁵ Это предположение справедливо с высокой степенью точности. Разумеется, причина этого не в характерном для задач статистической физики „перемешивании“, обусловленном длительным движением системы при наличии очень слабого взаимодействия её с окружающей средой, а в особенностях β -распада. Эта задача приведена здесь как пример эффективного использования важного для нас представления о статистическом весе.

Решение:

Вклад в статистическую сумму кинетической энергии молекул таков же как для газа в постоянном объеме. Вклад потенциальной энергии (записанный для одной частицы) —

$$z_U = (V - V_1) + V_1 e^{U_0/T} = V_1 e^{U_0/T} \left(1 + \frac{V - V_1}{V_1} e^{-U_0/T} \right)$$

с точностью до множителя, не дающего вклада в теплоёмкость, подобен статистической сумме, двухуровневой системы с сильно вырожденным верхним уровнем. Зависимость $C(T)$ имеет максимум при $T \sim U_0 / \ln \frac{V - V_1}{V_1}$.

Предложенная модель двухуровневой системы помогает понять, почему максимум теплоёмкости сдвигается в область температур, низких по сравнению с U_0 .

Задача 28. Найти энергию взаимодействия двух молекул $\langle U \rangle$, имеющих электрические дипольные моменты, усреднённую по их направлениям, в зависимости от расстояния между молекулами в случае, когда $U \ll T$.

Решение:

Энергия взаимодействия двух диполей \mathbf{d}_1 и \mathbf{d}_2 , находящихся на расстоянии R , равна

$$U = \frac{\mathbf{d}_1 \mathbf{d}_2 - 3(\mathbf{d}_1 \mathbf{n})(\mathbf{d}_2 \mathbf{n})}{R^3},$$

здесь \mathbf{n} — единичный вектор, задающий направление от одного диполя к другому. Действуя так же, как в предыдущей задаче, и принимая во внимание, что усреднение по направлениям двух диполей должно быть независимым, получаем

$$\langle U \rangle = -\overline{U^2}/T = -\frac{2}{3} \frac{d_1^2 d_2^2}{T R^6},$$

где черта над выражением означает усреднение по направлениям векторов $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2$.

При попытке усреднения по расположению молекул необходимо было бы принять во внимание не только их притяжение, но и отталкивание на малых расстояниях.

Задача 29. Больцмановский газ находится в поле

$$U(z) = \begin{cases} U_0 \ln \frac{r}{a} & \text{при } r < a, \\ \infty & \text{при } r > a. \end{cases}$$

Найти теплоёмкость газа и его давление на стенку при $r = a$.

Решение:

Вклад в статсумму частицы от распределения по импульсам таков же, как для газа в заданном объёме. Вклад от распределения по координатам

$$z_u = \int_0^a e^{-U/T} dV = 4\pi a^{U_0/T} \int_0^a r^{2-U_0/T} dr = \frac{V}{1-T_0/T}, \quad (53)$$

где обозначено

$$V = \frac{4}{3}\pi a^3, \quad T_0 = \frac{U_0}{3}.$$

При $T < T_0$ интеграл (53) расходится, так что в этом случае потребуется дополнительное исследование.

Вклад z_u в свободную энергию газа

$$F_u = -NT \ln V + NT \ln(1 - T_0/T), \quad (54)$$

потенциальная энергия газа

$$E_u = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \frac{F_u}{T} = -\frac{NT_0}{1-T_0/T}, \quad (55)$$

теплоёмкость

$$C = N(c_V + c_u), \quad Nc_u = \frac{\partial E_u}{\partial T} = \frac{N}{(T/T_0 - 1)^2}. \quad (56)$$

При $U_0 \rightarrow 0$, разумеется, $C_u \rightarrow 0$. При $T \rightarrow T_0 + 0$ оказывается $E_u \rightarrow -\infty$, $C_u \rightarrow \infty$, понизить температуру такого газа ниже T_0 невозможно: нужно было бы отвести бесконечное количество энергии. Нетрудно сообразить, что эта энергия берётся за счёт падения частиц в центр поля.

Концентрация частиц $n \propto e^{-U/T} = (a/r)^{U_0/T}$,

$$n = \frac{N}{V} \left(1 - \frac{T_0}{T}\right) \left(\frac{a}{r}\right)^{3T_0/T}.$$

Найдём, сколько частиц окажется в очень малой окрестности центра, при $r < \varepsilon$.

$$N_\varepsilon = 4\pi \int_0^\varepsilon nr^2 dr = N \left(\frac{\varepsilon}{a}\right)^{3(1-T_0/T)}.$$

При $T \rightarrow T_0 + 0$ оказывается $N_\varepsilon \rightarrow N$: в центр попадают все частицы. Подробнее о предельных температурах см. [8, § 67].

Давление газа при $r = a$ находим как $P = nT$,

$$P|_{r=a} = \frac{NT}{V} \left(1 - \frac{T_0}{T} \right).$$

Попытка выразить давление как $P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T$ (с F из (54)) приводит к ошибочному результату, легко сообразить, почему.

Заметим, что в поле с более сильной особенностью, чем логарифмическая, например, в поле $U = -\alpha/r$ частицы классического идеального газа в статистическом равновесии упадут в центр поля при любой температуре: $\int_{r<\varepsilon} ndV \rightarrow \infty$. Это означает, конечно, что такая модель газа в таком случае неприменима. Тем интереснее будет увидеть, как справились с этой трудностью при рассмотрении равновесной плазмы.

Задача 30. К какому вкладу в статистическую сумму атома водорода приводит учёт возбужденных состояний атома?

Решение:

Вклад в статистическую сумму возбужденных состояний атома

$$z = 4 \sum_{n=1}^{\infty} n^2 \exp \frac{e^2}{2n^2 a_B T},$$

(e — заряд электрона, a_B — боровский радиус, множитель 4 — из-за спинового вырождения), рассматриваемый формально, расходится. В действительности верхний предел суммирования по n , n_{max} , возникающий, например, из-за большого размера возбуждённых атомов, невелик, функция $n^2 \exp \frac{e^2}{2n^2 a_B T}$ быстро убывает с ростом n и при $n < n_{max}$ не достигает ещё своего минимума. Если температура порядка комнатной, $T \sim 1/40$ эВ, то слагаемые быстро убывают. Возьмем два:

$$z = 4e^{-A/T} \left(1 + e^{-3A/4T} \right),$$

где $A = e^2/2a_B$. Тогда свободная энергия

$$F = -NT \ln z \approx -N \left(-\frac{e^2}{2a_B} + Te^{-3A/4T} \right).$$

Первое слагаемое — энергия ионизации, второе — малая добавка. Если же $T \sim 5000^\circ K$ (как на Солнце), то нужна сумма, $z \approx 4n_{max}^3/3$

– величина большая. В этом случае следует учесть, что размер атома быстро растет с увеличением n как $a_B n^2$ и становится существенным взаимодействие с другими атомами. Кроме того, при высокой энергии становится заметной вероятность ионизации.

Задача 31. Больцмановский газ заряженных частиц находится в поле $U = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$ и постоянном однородном магнитном поле, направленном по оси z . Пренебрегая взаимодействием зарядов между собой, найти магнитный момент газа. Выразить магнитную восприимчивость в расчёте на одну частицу.

Решение:

Уровни энергии для частицы в однородном магнитном поле и кратности их вырождения можно найти, например, следующим образом. В книге [22, задача 11.8] приведено каноническое преобразование, приводящее к диагональному виду гамильтониан заряженной частицы в магнитном поле. Это линейное преобразование, и легко видеть, что такое же преобразование для операторов координат и импульсов представляет собой унитарное преобразование, которое приводит гамильтониан к виду

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \frac{\hat{p}_z^2}{2m},$$

где $\hat{H}_{1,2}$ – гамильтонианы осцилляторов с частотами⁶

$$\omega_{1,2} = \tilde{\omega} \pm \omega_B, \quad \omega_B = \frac{eB}{2mc}, \quad \tilde{\omega} = \sqrt{\omega^2 + \tilde{\omega}_B^2}.$$

Движение вдоль магнитного поля не зависит от поля и не даёт вклада в магнитные свойства газа. Уровни энергии для поперечного движения $E_{n_1, n_2} = \hbar\omega_1(n_1 + 1/2) + \hbar\omega_2(n_2 + 1/2)$ совпадают с уровнями энергии пары независимых гармонических осцилляторов (и являются невырожденными), так что можно сразу же записать вклад поперечного движения в свободную энергию

$$F_\perp = \sum_{1,2} \left(\frac{\hbar\omega_{1,2}}{2} + T \ln(1 - e^{-\hbar\omega_{1,2}/T}) \right)$$

Магнитный момент газа

$$\mathcal{M} = -\frac{\partial F_\perp}{\partial B} = -N \sum_{1,2} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\hbar\omega_{1,2}/T} - 1} \right) \hbar \frac{\partial \omega_{1,2}}{\partial B}.$$

⁶ Частоты $\omega_{1,2}$ легко найти, рассматривая движение частицы по окружности, лежащей в плоскости, перпендикулярной магнитному полю.

Подставив

$$\hbar \frac{\partial \omega_{1,2}}{\partial B} = \pm \frac{\omega_{1,2}}{\tilde{\omega}} \mu, \quad \mu = \frac{e\hbar}{2mc},$$

получаем

$$\mathcal{M} = -\frac{N\mu}{2} \left(\frac{\omega_2}{\tilde{\omega}} \coth \frac{\hbar\omega_2}{2T} - \frac{\omega_1}{\tilde{\omega}} \coth \frac{\hbar\omega_1}{2T} \right).$$

Определим магнитную восприимчивость в расчете на одну частицу как $\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial \mathcal{M}}{\partial B} \Big|_{B=0}$. При вычислении можно заменить

$$\hbar \frac{\partial \omega_{1,2}}{\partial B} \Big|_{B \rightarrow 0} \rightarrow \pm \mu, \quad \omega_{1,2} \rightarrow \omega, \quad \tilde{\omega} \rightarrow \omega.$$

В результате

$$\chi = -\frac{\mu^2}{\hbar\omega} \left(\coth \frac{\hbar\omega}{2T} - \frac{\hbar\omega}{2T} \operatorname{sh}^{-2} \frac{\hbar\omega}{2T} \right).$$

При $T \ll \hbar\omega$ получаем $\chi = -\frac{\mu^2}{\hbar\omega} = -\frac{e^2}{4mc^2} \frac{\hbar}{m\omega}$, что соответствует атомному диамагнетизму (см., например, [5, §113]). При $T \gg \hbar\omega$ получаем $\chi = -\frac{\mu^2}{3T}$ — диамагнетизм Ландау.

Задача 32. В этой задаче обсуждается мысленный эксперимент, впрочем, не так уж далёкий от опыта Эйнштейна — де-Гааза.

В процессе решения задачи допустимо так или иначе уточнять и модифицировать её условия.

На цилиндр, который может свободно вращаться вокруг своей оси, вдоль направления оси падает N электронов, поляризованных вдоль той же оси. Электроны застревают в цилиндре и частично деполяризуются. Вследствие сохранения проекции момента импульса на ось, цилиндр приходит во вращение. Первый (простой) вопрос: откуда взялась энергия вращения?

Главный вопрос: как узнать, какой угловой скорости достигнет цилиндр?

Решение:

Если перевернётся N_1 электронов, закон сохранения момента импульса приводит к равенству $I\Omega = \hbar N_1$, где I — момент инерции цилиндра, Ω — его угловая скорость. Энергия вращения $E_k = \Omega^2/2I$ будет взята из внутренней энергии, так что энтропия цилиндра уменьшится

на $S_0 = E_k/T$, где T — температура цилиндра. (Её считаем неизменной, принимая, что теплоёмкость цилиндра достаточно велика.) Энтропия электронов, связанная с ориентацией их спинов, станет равна $S_e = \ln C_N^{N_1} = \ln \frac{N!}{N_1!(N-N_1)!}$. Величина N_1 определяется условием, чтобы прирост энтропии был максимальным: $\frac{\partial}{\partial N_1}(S_e - S_0) = 0$, откуда $\Omega = N\hbar/I(1 + e^{\hbar\Omega/T})$.

Задача 33. Цепочка состоит из N звеньев длины a . Каждое звено может свободно поворачиваться в пространстве. Верхний конец цепочки закреплён, к нижнему — подвешен груз веса f . Найти зависимость среднего значения длины цепочки от температуры.

Решение:

Приведём сначала решение задачи об одномерной полимерной цепочке, см. стр. 13, с использованием канонического распределения.

Поскольку полная энергия при этом предполагается не заданной, состояние каждого из звеньев можно считать не зависящим от состояний других. Поэтому статистическая сумма цепочки равна произведению статистических сумм отдельных звеньев: $Z = z^N$, где $z = e^{\beta af} + e^{-\beta af}$, (вновь — с учётом только потенциальной энергии). Среднее значение потенциальной энергии цепочки $E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z = -Naf \text{th}(\beta af)$, откуда

$$l = Na \text{th}(af/T), \quad (57)$$

что совпадает с найденным выше уравнением состояния.

Рассмотрим теперь трехмерную модель. Примем, что каждое звено цепочки, длиной \tilde{a} , может свободно поворачиваться, принимая с равной вероятностью любое направление. Кинетическую энергию теплового движения звеньев по-прежнему относим к энергии термостата.⁷ Тогда для статистической суммы одного звена имеем

$$z = \int e^{-\beta \tilde{a} f \cos \theta} d\Omega = 2\pi \int_{-1}^1 e^{-\beta \tilde{a} f c} dc = 4\pi \frac{\text{sh} \beta \tilde{a} f}{\beta \tilde{a} f}.$$

⁷ Поэтому находить теплоёмкость цепочки мы не можем.

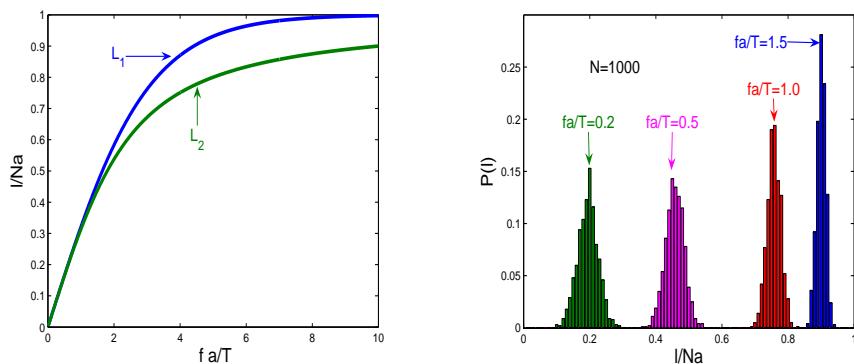


Рис. 7. Зависимость длины полимерной цепи от приложенной силы для двух моделей, L_1 – формула (57), L_2 – формула (58) (левая часть). Функция распределения расстояния между концами цепи в одномерной модели для различных значений растягивающей силы (справа)

Среднее значение потенциальной энергии⁸

$$E = -lf = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z = L(\frac{\tilde{a}f}{T}), \quad (58)$$

где

$$L(x) = \frac{1}{x} - cth x$$

– функция Ланжевена, известная из теории магнетизма, ($L(x) = \frac{x}{3}$ при $x \ll 1$). Зависимость длины цепочки от приложенной силы при малом значении af/T будет совпадать с (57) при условии $\tilde{a} = 3a$, рис. 7. Однако при больших значениях приложенной силы имеется заметное различие в предсказаниях двух моделей. Наблюдаются также заметные флуктуации расстояния между концами цепи, особенно при малых значениях растягивающей силы.

Величина $\frac{\partial E}{\partial T}$ определяет вклад в теплоёмкости цепочки от её потенциальной энергии (при постоянном значении f), и сама по себе едва ли представляет интерес.

⁸Крохотное уточнение: чтобы цепочка висела так, что груз находился бы внизу, у одного (скажем, первого) звена надо выбрать какое-то определённое значение угла θ , что несколько изменит вклад его в статсумму и совершенно нечувствительно скажется на её логарифме, при больших N , разумеется.

4. Распределение Максвелла

Задача 34. Оценить количество N молекул в аудитории с кинетической энергией не менее ε_0 для $\varepsilon_0=1,2,3,4$ эВ (согласно распределению Максвелла). Для случая, когда окажется $N \ll 1$, оценить время, спустя которое появится хотя бы одна молекула с такой энергией.

Решение:

Из распределения по скоростям

$$w(v)dv = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi T}\right)^{3/2} e^{-mv^2/2T} v^2 dv.$$

можно получить распределение по энергиям. Например, для $\varepsilon = mv^2/2$ получаем

$$dw = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-\varepsilon/T} \sqrt{\frac{\varepsilon}{T}} d\left(\frac{\varepsilon}{T}\right).$$

Вероятность найти молекулу с энергией $\varepsilon \geq \varepsilon_0$ для $\varepsilon_0 \gg T$ даётся интегралом

$$w_0 = w(\varepsilon \geq \varepsilon_0) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\varepsilon_0/T}^{\infty} e^{-\varepsilon/T} \sqrt{\frac{\varepsilon}{T}} d\left(\frac{\varepsilon}{T}\right) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{T}} e^{-\varepsilon_0/T}$$

Для $\varepsilon_0 = 1$ эВ при нормальных условиях в 1 см³ находится примерно 600 молекул. Однако уже для $\varepsilon_0 = 2$ эВ вероятность найти такую молекулу составляет $\sim 10^{-34}$, поэтому таких энергичных частиц нет даже в большой аудитории.

Скоро ли появится молекула с энергией $\varepsilon > \varepsilon_0 \sim 2$ эВ? Для одной молекулы „испытания“ происходят с частотой её столкновений (при каждом столкновении изменяется её скорость). Это частота $\nu \sim v_T/l$, где $v_T \sim \sqrt{T/m}$ — характерная (тепловая) скорость молекулы, $l \sim 1/n\sigma$ — длина свободного пробега, n — концентрация газа, σ — сечение столкновений молекул. Для N молекул число „испытаний“ за время t равно $N\nu t$ ($N = nV$ — число молекул в комнате, объём которой равен V). Среднее число „успешных испытаний“ составляет $w_0N\nu t$. Время ожидания появления молекулы с энергией выше ε_0 оценивается как $t \sim 1/(w_0N\nu) \sim \sqrt{\frac{T}{\varepsilon_0}} e^{\varepsilon_0/T}/(N\nu) \sim 10^{-36+17\varepsilon_0(\text{эВ})}$ с. Для $\varepsilon_0 \geq 3$ эВ это время превышает возраст Вселенной.

Задача 35. Средняя кинетическая энергия молекулы больцмановского газа равна $\frac{3}{2}T$. Найти среднюю величину кинетической энергии молекулы, падающей на стенку.

Решение:

Поскольку частицы, имеющие большее значение скорости, быстрее достигают стенки, можно ожидать что искомая энергия $\langle \varepsilon \rangle$ больше средней энергии молекулы в объёме газа, $3T/2$.

Пусть ось z направлена перпендикулярно стенке наружу. Разобъем кинетическую энергию молекулы $mv^2/2$ на два слагаемых: $\varepsilon_{xy} = m(v_x^2 + v_y^2)/2$ и $\varepsilon_z = mv_z^2/2$. Число частиц, налетающих на единичную площадку стенки за единицу времени, выражается через концентрацию молекул n_0 и функцию распределения по компоненте скорости v_z

$$f(v_z) = \sqrt{\frac{m}{2\pi T}} e^{-mv_z^2/2T}$$

как

$$n = n_0 \int_0^\infty v_z f(v_z) dv_z = n_0 \sqrt{\frac{T}{2\pi m}} \int_0^\infty z e^{-z^2} dz = \frac{n_0}{2} \sqrt{\frac{T}{2\pi m}},$$

а вклад ε_z в кинетическую энергию этих частиц

$$n\langle \varepsilon_z \rangle = n_0 \int_0^\infty \varepsilon_z v_z f(v_z) dv_z = n_0 \sqrt{\frac{T}{2\pi m}} T \int_0^\infty z^3 e^{-z^2} dz = \frac{n_0}{2} \sqrt{\frac{T}{2\pi m}} T.$$

Таким образом $\langle \varepsilon_z \rangle = T$. На величину $\langle \varepsilon_{xy} \rangle = T$, движение в направлении z , приводящее к столкновению со стенкой, не влияет. В итоге $\langle \varepsilon \rangle = 2T$. (Для двухатомного газа это движение не влияет и на энергию вращений и колебаний молекул).

Если в откачанный сосуд впустить через отверстие размера $d \ll \lambda$ (где λ — длина свободного пробега) небольшую порцию газа с температурой T (небольшую — для того, чтобы можно было пренебречь обратным потоком), то после установления равновесия температура газа в сосуде станет равной $T' = (2/3)\langle \varepsilon \rangle = 4T/3$.

Для обратного случая, $d \gg \lambda$, температура вошедшего в отверстие одноатомного газа $T' = 5T/3$ (см. задачу 1.3, [1, § 39]). Различие этих результатов не должно нас удивлять, потому что механизмы увеличения средней энергии попавших в сосуд частиц различны: в случае $d \ll \lambda$

в отверстие попадает больше быстрых частиц, а в случае $d \gg \lambda$, газ движется, как сплошная среда, и над ним совершают работу атмосферный воздух.

Задача 36. Газ представляет собой смесь частиц нескольких типов с массами m_i и концентрациями n_i , $i = 1, 2, \dots$. Сечение столкновений частиц „1“ и „2“ зависит от их относительной скорости,⁹ $\sigma(v_{\text{отн}})$. Выразить среднее число столкновений этих частиц в единице объема за единицу времени.

Решение:

Выберем одну частицу типа „1“ со скоростью \mathbf{v}_1 и выразим среднее число столкновений ее $d\nu$ за 1 секунду с частицами типа „2“, скорость которых лежит в области d^3v_2 вблизи \mathbf{v}_2 . Плотность потока таких частиц, записанная в системе отсчета, в которой частица „1“ неподвижна перед столкновением,¹⁰ $j' = v_{\text{отн}} n_2 f_2(v_2) d^3v_2$, где $v_{\text{отн}} = |\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1|$ — скорость частицы „2“ в системе частицы „1“, а число столкновений выражается через сечение: $d\nu = \sigma(v_{\text{отн}}) j'$. Полное число столкновений в объеме dV (за 1 секунду) получаем, просуммировав по всем скоростям частиц „2“ и по всем частицам „1“ :

$$\nu = \int \sigma(v_{\text{отн}}) v_{\text{отн}} n_2 f_2(v_2) d^3v_2 n_1 f_1(v_1) d^3v_1 dV.$$

Как и следовало ожидать, величина ν не изменяется при замене 1 \rightleftharpoons 2.

Далее ограничимся случаем, когда скорости частиц нерелятивистские.

Удобно перейти в интеграле к относительной скорости и скорости центра масс:

$$\mathbf{v}_{\text{отн}} = \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1, \quad \mathbf{V}_{\text{цм}} = (m_1 \mathbf{v}_1 + m_2 \mathbf{v}_2) / (m_1 + m_2).$$

Тогда

$$f_1(v_1) f_2(v_2) d^3v_1 d^3v_2 = f_{\text{цм}}(V_{\text{цм}}) f_{\text{отн}}(v_{\text{отн}}) d^3V_{\text{цм}} d^3v_{\text{отн}},$$

⁹ Относительная скорость — это величина скорости одной из частиц в той системе отсчета, где другая поконится.

¹⁰ Для релятивистских скоростей частиц в системе покоя частицы „1“ концентрация частиц „1“ равна $n'_1 = n_1/\Gamma$, где $\Gamma = 1/\sqrt{1 - v_1^2/c^2}$, а плотность потока частиц „2“ (тех, скорость которых в лабораторной системе лежит в области d^3v_2 вблизи \mathbf{v}_2) — $j' = n'_2 v_{\text{отн}} f_2(v_2) d^3v_2$, где $v_{\text{отн}} = \sqrt{(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1)^2 - [\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2]^2/c^2}/(1 - \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2/c^2)$, $n'_2 = n_2(1 - \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2/c^2)\Gamma$.

где

$$f_{\text{им}}(V_{\text{им}}) = \left(\frac{m_1 + m_2}{2\pi T}\right)^{3/2} e^{-(m_1 + m_2)V_{\text{им}}^2/2T},$$

$$f_{\text{отн}}(v_{\text{отн}}) = \left(\frac{m}{2\pi T}\right)^{3/2} e^{-mv_{\text{отн}}^2/2T},$$

$m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ – приведенная масса. Проинтегрировав по скорости центра масс, получим для числа столкновений в объёме dV за время dt

$$d\nu_{12} = 4\pi n_1 n_2 \left(\frac{m}{2\pi T}\right)^{3/2} dV dt \int_0^\infty v_{\text{отн}}^3 \sigma(v_{\text{отн}}) e^{-mv_{\text{отн}}^2/2T} dv_{\text{отн}}$$

Если речь идет о столкновениях одинаковых частиц, то найденный результат нужно разделить пополам, $n_1 n_2 \rightarrow n^2/2$, так как в этом случае в нашей схеме расчёта каждое столкновение окажется учтённым дважды (каждая из частиц может играть роль как покоящейся, так и налетающей).

Задача 37. Сколько воды испарится при 20°C за 1 с с 1 см^2 её поверхности, обдуваемой сухим воздухом? Давление насыщенных паров при 20°C равно 18 мм рт. ст. Какой поток тепла должен бы подводиться к поверхности, чтобы обеспечить такую скорость испарения?

Решение:

Пусть поверхность воды находится в контакте с насыщенным паром. Тогда поток молекул, покидающих воду, компенсируется потоком молекул, попадающих в нее из пара. Плотность потока молекул, достигающих поверхности воды, найдена в предыдущей задаче:

$$j = \frac{n_0}{2} \sqrt{\frac{T}{2\pi m}} = \frac{P}{\sqrt{2\pi mT}}.$$

Если принять, что каждая молекула, достигающая поверхности воды, поглощается, то такой же должна быть и плотность потока молекул, покидающих воду. [1, § 39].

Необходимый подвод тепла в задаче определяется как $Q = qj$, где $q = 2500(\text{Дж}/\text{г})/(6 \cdot 10^{23} \text{ частиц}/18\text{ г}) = 7,5 \cdot 10^{-20} \text{ Дж}/\text{частица}$ – скрытая теплота испарения. В итоге

$$j = 2,4 \cdot 10^{20} \text{ 1}/(\text{см}^2 \text{ с}). Q = 180 \text{ кВт}/\text{см}^2.$$

(Величина q включает не только среднюю энергию вылетающих частиц и их энергию связи, но и *работу вытеснения*, связанную с увеличением объёма вещества при испарении. Впрочем, доля работы вытеснения невелика.) Необходимый подвод тепла очень велик, так что найденная скорость испарения может поддерживаться в течение малого времени. Поверхность воды очень быстро охладится.

Насколько справедливо предположение, что прилипает каждая молекула? В работе [14] указано, что к поверхности воды в условиях, примерно таких, как в этой задаче, прилипает на самом деле лишь одна молекула из 25. Это снижает численные оценки скорости испарения, необходимого подвода тепла и скорости охлаждения воды, но не отменяет тот факт, что поверхность воды очень быстро охладится и скорость испарения очень быстро упадёт.

Задача 38. Пусть вероятность столкновений молекул максвелловского газа определяется сечением столкновения, зависящим от их относительной скорости: $\sigma = \sigma_0(1 + v_0^2/v_{\text{отн}}^2)$. Найти частоту столкновений и среднюю длину свободного пробега молекул.

Задача 39. Найти распределение плотности в атмосфере планеты, считая её изотермической.

Решение:

Концентрация газа с массой молекулы m на расстоянии r от центра планеты $n = n_0 \exp \left[\gamma m t_0 \left(\frac{1}{rT} - \frac{1}{r_0 T} \right) \right]$. При $r \rightarrow \infty$ концентрация стремится к постоянной $n_0 \exp \left(-\frac{v_2^2}{v_T^2} \right)$, где v_2 — вторая космическая скорость, а vt — тепловая. Полное число молекул, окружающих планету бесконечно. Если представить себе, что в начальном состоянии весь газ был связан с планетой, то в равновесном состоянии должно быть $n_0 \rightarrow 0$, т. е. планета теряет атмосферу (правда, в интереснейшем случае — очень медленно).

Некоторые звёздные скопления можно рассматривать как „газ“, молекулы которого — отдельные звёзды, находящиеся в создаваемом ими же поле тяготения. Устанавливается распределение по энергиям звёзд, очень похожее на максвелловское, но самые быстрые из них покидают скопление, так что такие звёздные скопления постепенно „испаряются“.

Задача 40. В гравитационном поле звезды массы M и радиуса R находится разреженный больцмановский газ, состоящий из частиц массы m . Температура газа T , плотность его на большом удалении от звезды n . Найти число частиц газа, падающих на звезду за одну секунду.

Считать, что длина свободного пробега частиц газа велика по сравнению с радиусом звезды.

Решение:

Число частиц, падающих на звезду за единицу времени,

$$\nu = n \int \sigma v f(\mathbf{v}) d^3 v = 4\pi n \int_0^\infty \sigma v^3 \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{3/2} e^{-mv^2/2T} dv,$$

где $\sigma = \pi R^2 \left(1 + \frac{2GM}{v^2 R} \right)$ — сечение падения частицы на шар радиуса R с учётом притяжения, обусловленного потенциальной энергией $U = -\frac{GMm}{r}$, а $f(\mathbf{v}) = \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{3/2} e^{-mv^2/2T}$ — функция распределения частиц по скоростям. Окончательно

$$\nu = R^2 n \sqrt{\frac{8\pi T}{m}} \left(1 + \frac{GMm}{RT} \right).$$

Подчеркнём, что это решение относится к случаю, когда газ вокруг звезды настолько разреженный, что длина свободного пробега превышает размер звезды, так что в основном на звезду падают частицы, находившиеся далеко от неё.

В подобных условиях поток частиц на звезду весьма мал.

Задача 41. Оценить время, за которое планета может потерять свою атмосферу. (Принимая, что атмосфера изотермическая).

Решение:

Число частиц, покидающих Землю, можно приравнять к числу частиц, падающих на нее в условиях, когда концентрация n распространяется „до бесконечности“. Хотя в действительности на каком-то расстоянии от Земли становятся существенными влияния Луны и Солнца, интересующее нас число улетающих частиц определяется процессами, происходящими в атмосфере и её окрестностях, и не должно сильно измениться при замене истинной ситуации на эту несколько идеализированную модель.

Легко проверить, что концентрация газа n в космическом пространстве, отвечающая условиям равновесия с концентрацией n_0 на поверхности Земли, $n = n_0 \exp(-v_2^2/v_T^2)$, достаточно мала, чтобы длина свободного пробега в таком газе была много больше радиуса Земли.

Число частиц, падающих на Землю за секунду, находим, как это сделано в задаче 40. Сечение падения ¹¹ $\sigma = \pi r_0^2(1 + v_2^2/v^2)$.

Число столкновений в секунду $\nu = 4\pi n\langle\sigma v\rangle$, $\langle\sigma v\rangle \approx \pi r_0^2 v_2^2/v_T^2$. Время потери атмосферы оцениваем, как $t_0 \sim N/\nu$.

Для Земли время t очень велико, для Луны — нет. Различие обусловлено, в первую очередь, различием величин второй космической скорости. (См. также [13, § 79])

5. Термические свойства молекул

Задача 42. Рассмотреть зависимость теплоёмкости от температуры для газов CO_2 и H_2O . Молекулы CO_2 имеют линейную форму, а молекулы H_2O — треугольную.

Решение:

Вклад в теплоёмкость c_V поступательных степеней свободы всегда составляет $3/2$ в расчёте на молекулу. Вклады вращательных степеней свободы „вымерзают“ при очень низких температурах (для водорода вращательная теплоёмкость проявляется при $T > 100$ К, квантовые свойства вращательного движения проявляются у молекул с очень малыми моментами инерции, например, у CH_4).

Вклад каждой вращательной степени свободы при достаточно высоких температурах (т. е. при $T \gtrsim 10$ К) равен $1/2$. Молекула углекислого газа линейная, поэтому у неё две вращательные степени свободы, молекула воды имеет форму треугольника и у неё вращательных степеней свободы три. Пока не „включились“ колебания, теплоёмкость в расчёте на молекулу у углекислого газа равна $5/2$, у водяного пара — 3 .

Каждая колебательная степень свободы даёт при достаточно высоких температурах вклад в теплоёмкость, равный 1 (хотя реально это не всегда достижимо из-за диссоциации молекул при таких высоких температурах). Кроме того нужно заметить, что разным колебательным степеням свободы, как правило, отвечают разные частоты, так что „включаются“ колебательные вклады в теплоёмкость при разных температурах.

Всего у трехатомной молекулы 9 степеней свободы. Три из них приходится на поступательное движение. Для линейной молекулы есть две

¹¹ Сечение падения частицы на Землю определяется, среди прочего, ее радиусом, который естественно отсчитывать в данном случае до верхних слоев атмосферы. Для этого расстояния от Земли и определяется вторая космическая скорость, входящая в сечение падения.

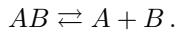
вращательных степеней свободы, поэтому на колебательные приходится четыре степени свободы. Для нелинейной есть три вращательных и следовательно три колебательных степеней свободы.

Для очень высоких температур, когда в теплоёмкость дают вклад все степени свободы, для линейной молекулы $C_v = 3/2 + 2 \cdot 1/2 + 4 \cdot 1 = 13/2$, а для нелинейной $C_v = 3/2 + 3 \cdot 1/2 + 3 \cdot 1 = 6$.

Задача 43. Найти зависимость степени диссоциации и теплоемкости двухатомного газа от температуры при заданном объёме.

Решение:

Диссоциацию можно представлять себе как химическую реакцию



Пусть при очень низких температурах было N_0 молекул. При повышении температуры часть молекул диссоциирует, так что останется N_m молекул и $N_A = N_B = N_0 - N_m$ атомов типа A и B . Введем степень диссоциации $\alpha \equiv N_A/N_0$. Эта величина может изменяться в пределах $0 \leq \alpha \leq 1$. Число атомов и молекул выражаются через степень диссоциации следующим образом:

$$N_A = N_B = \alpha N_0, \quad N_m = (1 - \alpha) N_0.$$

Условие химического равновесия

$$\mu_{AB} = \mu_A + \mu_B, \quad (59)$$

где μ — химический потенциал газа. Для идеального газа

$$\mu_i = -T \ln \frac{z_i}{N_i}, \quad i = A, B, AB. \quad (60)$$

где z — статистическая сумма одной молекулы.

Условие (59) учётом (60) даёт

$$\frac{z_A z_B}{N_A N_B} = \frac{z_{AB}}{N_{AB}},$$

или

$$\frac{\alpha^2}{1 - \alpha} = \frac{z_A z_B}{z_{AB} N_0}.$$

Обозначим энергию диссоциации молекулы W . Если сообщить такую энергию атомам покоящейся молекулы, то они разлетятся в разные стороны, причем скорость их по мере разлета будет стремиться к нулю.

Записывая статсуммы для разных частиц, нужно согласовать их начала отсчета энергии: принимая за ноль энергии покоящихся атомов A и B , будем считать энергию покоящейся молекулы AB равной $-W$. Статсумма частицы A

$$z = g_A V \int e^{-p^2/2mT} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = g_A V \left(\frac{mT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2},$$

аналогична статсумма атома B . Для молекулы нужно добавить множители¹²

$$z_{rot} = \frac{2IT}{\hbar^2}, \quad z_{vib} = \frac{e^{W/T}}{1 - e^{-\hbar\omega/T}}.$$

В итоге

$$\frac{\alpha^2}{1 - \alpha} = \frac{V}{N_0(2\pi)^{3/2}} \left(\frac{m_A m_B}{m_{AB}} \right)^{3/2} \frac{T^{1/2}}{2I\hbar} (1 - e^{-\hbar\omega/T}) e^{-W/T}. \quad (61)$$

Для разреженного газа уже при $T \lesssim \hbar\omega$ большая часть молекул диссоциирует. В этом случае

$$\frac{\alpha^2}{1 - \alpha} = \left(\frac{T}{T_0} \right)^{1/2} e^{-W/T},$$

где

$$T_0 = \frac{2I\hbar N_0 (2\pi)^{3/2}}{V} \left(\frac{m_{AB}}{m_A m_B} \right)^{3/2}.$$

Температуру $T_{\text{дис}}$, при которой степень диссоциации $\alpha = 1/2$, находим, решая это уравнение методом последовательных приближений.

$$T_{\text{дис}} \approx \frac{1}{2} \frac{W}{1 + \ln(W/T_0)}$$

Обратим внимание на странное поведение α в (61) при $T \rightarrow \infty$. Причина — в некорректном учёте колебательных уровней энергии при вычислении z_{vib} (подробнее см. в [8, § 50]).

Средняя энергия системы есть

$$\bar{E} = \alpha N_0 W + 3N_0 T \alpha + \frac{5}{2} N_0 (1 - \alpha) T = \alpha \left(W + \frac{T}{2} \right) N_0 + \frac{5}{2} N_0 T \quad (62)$$

¹² Если атомы A и B тождественны, то нужно добавить еще множитель — „число симметрии“ — аналог множителя $1/N!$ в статсумме газа.

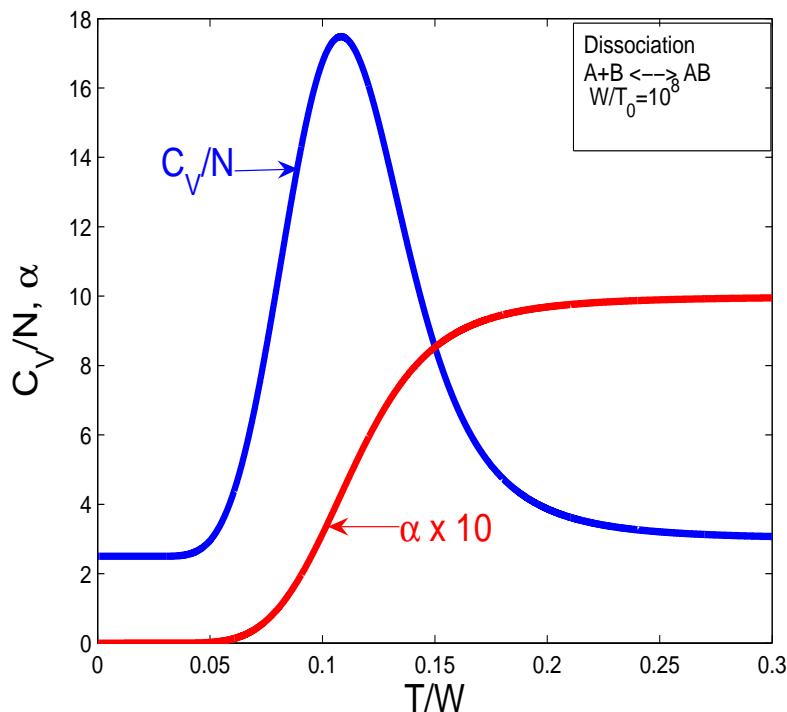


Рис. 8. Степень диссоциации α и теплоемкость C_V как функции температуры при $W/T_0 = 10^8$.

Тогда теплоемкость при постоянном объеме равна

$$C_v = \frac{d\alpha}{dT} \left(W + \frac{T}{2} \right) N_0 + \frac{\alpha}{2} N_0 + \frac{5}{2} N_0 \quad (63)$$

При низких температурах $T \ll T_{\text{дис}}$, где $\alpha \ll 1$, $d\alpha/dT \rightarrow 0$ когда имеются только молекулы, теплоемкость стремится к $5/2$. При высоких температурах $T \gg T_{\text{дис}}$ все молекулы диссоциировали и теплоемкость стремится к 3. Вблизи температуры диссоциации теплоемкость имеет максимум. Для его вычисления нам необходимо знать при $T = T_{\text{дис}}$ значение производной степени диссоциации. Используя выражение через

α условие минимума свободной энергии, получаем

$$\left(\frac{d\alpha}{dT}\right)_{\alpha=1/2} = \frac{1}{6T_{\text{дис}}^2} \left(W + \frac{T_{\text{дис}}}{2}\right) \quad (64)$$

Тогда

$$C_v|_{\alpha=1/2} = \frac{1}{6} \left(\frac{W}{T_{\text{дис}}} + \frac{1}{2}\right)^2 N_0 + \frac{5}{2} N_0 \quad (65)$$

Поскольку $W \gg T_{\text{дис}}$, то теплоёмкость имеет резкий максимум, рис. 8, обусловленный диссоциацией молекул вблизи $T = T_{\text{дис}}$.

Задача 44. Выразить теплоёмкости C_V и C_P частично ионизированной плазмы через её степень ионизации $\alpha(T)$. Нарисовать графики $C_V(T)$ и $C_P(T)$. (Считая зависимость $\alpha(T)$ известной).

Решение:

Энергия газа

$$E = (N_A + N_e + N_i) \frac{3}{2} T + N_i I = N_0 \frac{3}{2} T + N_0 \alpha(T) \left(\frac{3}{2} T + I \right),$$

где N_0 — число атомов до нагревания, приведшего к ионизации, N_A, N_i, N_e — число нейтральных атомов, ионов и электронов, I — энергия ионизации атома. Теплоёмкость при постоянном объёме

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = N_0 \left[\frac{3}{2}(1 + \alpha) + \frac{d\alpha}{dT} I + \frac{3T}{2} \right].$$

С ростом температуры растет число частиц и при полной ионизации удваивается. Поэтому удваивается и теплоёмкость. Ионизация происходит в узком интервале температур в окрестности температуры много меньшей I (если концентрация газа не слишком велика). В этой области имеется узкий пик в зависимости $C_V(T)$.

На рис. 9 показана зависимость степени ионизации плазмы от температуры. На рис. 10 — $C_V(T)$. (Зависимость $\alpha(T)$ для рисунков взята из [8, § 49], принято $\frac{2V}{N_0} \left(\frac{mI}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} = 10^3$.)

Теплоёмкость при постоянном давлении выражается аналогично через энталпию. (Именно C_P входит в условие устойчивости атмосферы с градиентом температуры относительно конвекции.)

Задача 45. Найти изменение момента инерции молекулы, вызванное её „тепловым расширением“.

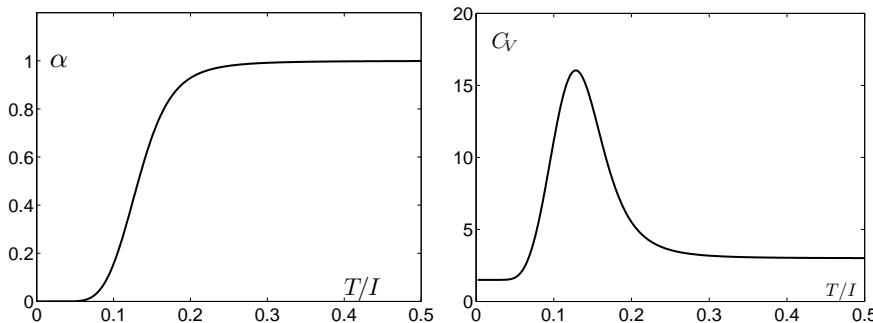


Рис. 9. Зависимость степени ионизации плазмы от температуры при постоянном объёме

Рис. 10. Зависимость теплоёмкости плазмы от температуры при постоянном объёме

Задача 46. Водород, имевший комнатную температуру, быстро охлаждали до температуры $T_0 \ll T_{rot} = \hbar^2/2I$, так что соотношение чисел молекул орто- и параводорода осталось равно 3 : 1. Затем происходит переход к соотношению, равновесному при низкой температуре. Какова будет в итоге температура водорода, если принять, что он теплоизолирован и объём его неизменен?

Задача 47. Сколько тепла выделяется в реакции $2O_3 \rightleftharpoons 3O_2$ при $T = 27^\circ C$, $P = 1$ атм? Для оценок принять энергию диссоциации O_2 равной 5,12 эВ, энергию разрыва связи $O_3 \rightarrow O_2 + O$ — равной 1,04 эВ. На сколько изменится найденная величина, если реакция идёт при постоянном объёме?

Задача 48. Найти теплоемкости орто- и пара-водорода.

Решение:

В случае молекулы, состоящей из одинаковых атомов, необходимо учитывать симметрию при перестановке ядер атомов. Например, для молекулы водорода волновая функция при перестановке двух протонов должна быть антисимметрична. Протоны могут находиться в состояниях с полным спином $S = 0$ (параводород) и $S = 1$ (ортоводород). Поскольку спиновая волновая функция ортоводорода симметрична, орбитальная должна быть антисимметрична, т. е. допустимы нечетные $j = 1, 3, 5, \dots$. Спиновая волновая функция параводорода антисимметрична, тогда орбитальная должна быть симметрична, т. е. допустимы четные $j = 0, 2, 4, \dots$. Характерное время изменения спинового состоя-

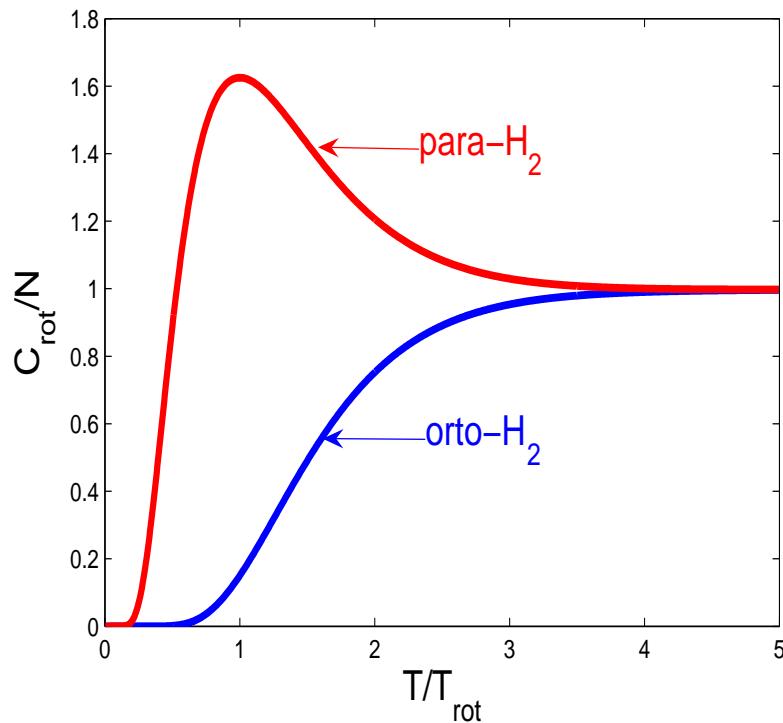


Рис. 11. Теплоемкость пара- и ортоводорода.

ния ядер в нормальных условиях составляет несколько дней, поэтому пара- и ортоводород ведут себя как смеси разных газов. На рис. 11 приведены их теплоемкости. Заметный максимум для параводорода наблюдается за счет большого значения отношения степеней вырожденности состояний с $j = 0$ и $j = 2$.

6. Вырожденный ферми-газ

Задача 49. Молекулы газа могут оседать (адсорбироваться) на поверхности сосуда. Имеется определённое количество мест на поверхности, на которые может быть адсорбирована молекула. Каждое из

них может принять не более одной молекулы. Какая доля возможных мест окажется занята молекулами? (Эта доля называется степенью адсорбции¹³.) Газ Больцмановский, давление его равно P , температура T . Энергия адсорбированной молекулы равна $-\varepsilon$.

Решение:

Разобьем поверхность на ячейки, которые могут быть либо пусты, либо заняты только одной частицей. Мы можем рассматривать одну ячейку как систему, способную обмениваться энергией и частицами с газом. Степень адсорбции θ — отношение числа адсорбированных молекул к числу мест на поверхности — равна среднему числу молекул, находящихся на каждом из возможных мест. Можно видеть, что условия заполнения мест такие же, как для фермионов с энергией $-\varepsilon$ (возможное число частиц 0 или 1). Поэтому величина θ определяется распределением Ферми:

$$\theta = \frac{1}{e^{-(\varepsilon+\mu)/T} + 1},$$

где μ — химический потенциал адсорбированных молекул, совпадающий вследствие условия равновесия относительно обмена частицами с химическим потенциалом этих частиц в газе

$$\mu = -T \ln \left[\frac{V}{N} \left(\frac{mT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right] = -T \ln \left[\frac{T^{5/2}}{P} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right],$$

(для простоты записи мы считаем газ одноатомным).

Таким образом получаем для степени адсорбции так называемую изотерму Ленгмюра.

$$\theta = [e^{\varepsilon/T} T^{5/2} (m/2\pi\hbar)^{3/2} / P + 1]^{-1} \equiv \frac{P}{P + P_0},$$

где использовано обозначение $P_0 = e^{\varepsilon/T} T^{5/2} (m/2\pi\hbar)^{3/2}$.

Во избежание недоразумений, заметим, что распределение Ферми возникло в этой задаче не вследствие тождественности частиц, а вследствие их „силового“ взаимодействия, (см. также [9, гл. 1, задача 29]). Результат не зависит от того, являются частицы фермионами или бозонами. Учёт же этого факта, что адсорбированная частица может иметь

¹³ Эта задача отнесена к теме „ферми-газ“ в связи с тем, что предполагаемый метод её решения широко используется в этом разделе.

разные состояния (например, спиновые), приведёт к некоторому изменению распределения (см. задачу 68).

Задача 50. Найти химический потенциал, среднюю энергию и давление электронов проводимости в меди, атомный вес $A \approx 64$ г/моль, плотность $\rho \approx 9$ г/см³, считая, что каждый атом меди поставляет один электрон проводимости.

Замечание. На самом деле в кристалле электроны движутся в периодическом поле, так что зависимость энергии от квазимпульса заметно сложнее, чем зависимость энергии от импульса для свободного электрона. Поэтому результат предлагаемого расчёта следует рассматривать как оценку.

Решение:

Считая, что каждый атом меди поставляет один электрон проводимости, имеем

$$\begin{aligned} \frac{N_e}{V} &= \frac{9 \cdot 6 \cdot 10^{23}}{64} \approx 9 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}, \\ \varepsilon_F &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3} \approx \\ &\approx \frac{10^{-54} \text{ эрг}^2 \text{ с}^2}{2 \cdot 10^{-27} \text{ Г}} (30 \cdot 9 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3})^{2/3} \approx 10^{-11} \text{ эрг} \approx 7 \cdot 10^4 \text{ }^\circ\text{К} \approx 6 \text{ эВ}, \\ P &= \frac{2}{5} \frac{N}{V} \varepsilon_F \approx 0,4 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3} \cdot 10^{-11} \text{ эрг} \approx 4 \cdot 10^5 \text{ атм}. \end{aligned}$$

Оценка ε_F показывает, что электронный газ в металлах при любых температурах является вырожденным.

Этот расчёт заслуживает наименования „оценка“, так как в действительности электронный газ в металлах (в том числе и в меди) многими свойствами отличается от описанного идеального газа свободных электронов.

Задача 51. Найти давление вырожденного электронного ультрапрелиativistского газа в зависимости от концентрации.

Решение:

Связь между импульсом Ферми и плотностью остается такой же, как для нерелятивистского электронного газа:

$$p_0 = \hbar \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}, \quad (66)$$

однако выражения для энергии и давления меняются

$$\begin{aligned}\varepsilon_0 &= cp_0 = \hbar c \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}, \\ E &= \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{p_0} cp p^2 dp = \frac{3}{4} N \varepsilon_0 = \frac{3}{4} N \hbar c \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}, \\ P &= \frac{c}{4} (3\pi^2)^{1/3} \hbar \left(\frac{N}{V} \right)^{4/3} = \frac{1}{3} \frac{E}{V}.\end{aligned}$$

Приведем также зависимость давления вырожденного ферми-газа от его плотности в случае промежуточных плотностей, когда газ не является ультрарелятивистским. Можно, например, выразить давление как

$$P = \int_{v_x > 0} 2p_x v_x f(\varepsilon) d\Gamma / V = \int_0^{p_0} \frac{pv}{3} \frac{2 \cdot 4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3},$$

где p_0 по-прежнему определяется (66), а $\varepsilon = c\sqrt{m^2 c^2 + p^2}$, $v = c^2 p / \varepsilon$. В результате несложных выкладок получаем

$$\begin{aligned}P &= \frac{m^4 c^5}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^x \frac{\xi^4 d\xi}{\sqrt{1 + \xi^2}} = \\ &= \frac{mc^2}{8\pi^2 \lambda_c^3} \left[x \sqrt{1 + x^2} (2x^2/3 - 1) + \ln(x + \sqrt{1 + x^2}) \right],\end{aligned}$$

где $x = p_0/mc$, $\lambda_c = \hbar/mc = 3,86 \cdot 10^{-11}$ см — комптоновская длина волны электрона.

Переход от зависимости $P \propto V^{-5/3}$ к $P \propto V^{-4/3}$ происходит в довольно широком интервале плотностей в окрестности λ_c^{-3} . На рис. 12 приведена изотерма электронного газа при нулевой температуре (в логарифмическом масштабе), на рис. 13 — зависимость наклона изотермы $-\frac{d \ln P}{d \ln V}$ от $\frac{V}{N \lambda_c^3}$.

Здесь уместно напомнить, что с повышением плотности электронного газа роль кулоновского взаимодействия электронов падает.

Задача 52. В атомах с большим числом Z электронов большая часть из них движется вблизи ядра в объёме с характерным размером R .

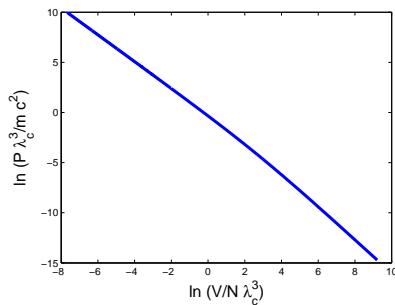


Рис. 12. Зависимость давления (в единицах mc^2/λ_c^3) от объема (в единицах $V/N \lambda_c^3$)

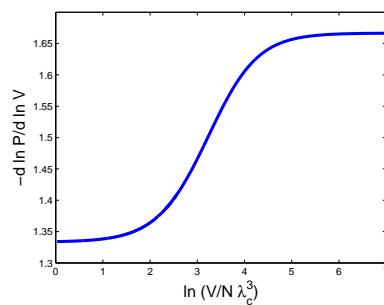


Рис. 13. Зависимость наклона изотермы, изображенной на рис. 12, $-\frac{d \ln P}{d \ln V}$, от объема

В модели Томаса – Ферми эти электроны рассматриваются как вырожденный электронный газ, температура которого равна нулю. (Один-два электрона движутся вблизи наружной части атома, где поле ядра почти полностью экранировано. Поэтому размеры всех атомов близки друг к другу.) Пренебрегая кулоновским взаимодействием электронов друг с другом, оценить величину R .

Решение:

Число электронов $N_e = Z$, объем $V \approx r^3$. Тогда кинетическая энергия частиц вырожденного ферми-газа есть

$$E_{\text{кин}} \approx \frac{Z \hbar^2}{m} \left(\frac{Z}{r^3} \right)^{2/3} \approx \frac{Z^{5/3} \hbar^2}{mr^2}.$$

Поскольку в среднем электроны находятся ближе к ядру чем друг к другу, полная энергия кулоновского взаимодействия по порядку величины равна

$$E_{\text{кул}} \approx -Z \frac{Ze^2}{r}.$$

Минимизируя полную энергию $E = E_{\text{кин}} + E_{\text{кул}}$ как функцию r , получаем

$$r \approx \frac{\hbar^2}{me^2 Z^{1/3}} \approx \frac{a_B}{Z^{1/3}}.$$

О модели Томаса – Ферми см. [5, § 70]. В задаче к указанному

параграфу показано, между прочим, что энергия взаимодействия электронов с ядром в модели Томаса – Ферми в 7 раз больше энергии их взаимодействия друг с другом, что до некоторой степени оправдывает пренебрежение последней.

Задача 53. “Одномерный атом Томаса – Ферми”. Тонкая пластина с поверхностной плотностью заряда σ окружена электронным газом, экранирующим заряд. Найти распределение потенциала и плотности заряда, считая электронный газ вырожденным.

Решение:

Максимальная энергия электрона

$$\frac{p_0^2}{2m} - e\phi = 0,$$

поскольку при удалении от пластины потенциал ϕ и плотность электронов n , связанная с импульсом Ферми p_0 соотношением $n = p_0^3/(3\pi\hbar^3)$, стремятся к нулю. Потенциал найдем из уравнения Пуассона

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \frac{4(2m)^{3/2}e^{5/2}}{3\pi\hbar^3}\phi^{3/2} \equiv a\phi^{3/2},$$

с граничным условием

$$-\left.\frac{d\phi}{dx}\right|_{x \rightarrow +0} = 2\pi\sigma.$$

Заменой переменных $\phi = \alpha\psi$, $x = \beta\xi$ приводим уравнение Пуассона к более простому виду

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \psi^{3/2},$$

потребовав выполнения условия $a\alpha^{1/2}\beta^2 = 1$. Граничное условие сводится к

$$-\left.\frac{d\psi}{d\xi}\right|_{\xi \rightarrow +0} = 1,$$

при выполнении соотношения $\alpha = 2\pi\sigma\beta$. Тогда

$$\alpha = \frac{(2\pi\sigma)^{4/5}}{a^{2/5}}, \quad \beta = \frac{(2\pi\sigma)^{-1/5}}{a^{2/5}}.$$

Первый интеграл уравнения Пуассона получается умножением на $d\psi/d\xi$ и интегрированием:

$$\frac{d\psi}{d\xi} = \frac{2}{\sqrt{5}}\psi^{5/4},$$

где константа интегрирования равна нулю т. к. $\psi \rightarrow 0$ при $\xi \rightarrow \infty$. Из другого граничного условия получаем $\psi(0) = (5/4)^{2/5}$. Еще одно интегрирование дает

$$\psi = \frac{400}{(\xi + C)^4},$$

где $C = 2\sqrt{5}(4/5)^{1/10}$. Интересно отметить, что $\psi(0) \approx 1.1$. При удалении от пластины плотность электронов убывает на больших расстояниях как $n(x) \sim x^{-6}$. Вблизи пластины $n(0) \sim \sigma^{6/5}$.

Задача 54. Найти магнитный момент и магнитную восприимчивость вырожденного электронного газа, связанные с магнитным моментом электрона.

Решение:

Возможны две разные проекции спина на направление магнитного поля, соответственно, два значения проекции магнитного момента электрона, $\pm\mu_0$, $\mu_0 = e\hbar/(2mc)$ (“по полю” и “против поля”), и разные вклады в энергию электрона, $\mp\mu_0\mathcal{H}$. В зависимости от ориентации спина различными окажутся и значения граничного импульса (при одной граничной энергии ε_F)

$$\frac{p_\uparrow^2}{2m} - \mu_0\mathcal{H} = \frac{p_\downarrow^2}{2m} + \mu_0\mathcal{H} = \varepsilon_F. \quad (67)$$

Количества частиц с каждой из ориентаций спина

$$N_{\uparrow\downarrow} = \frac{4\pi p_{\uparrow\downarrow}^3 V}{3(2\pi\hbar)^3}, \quad (68)$$

Полное число электронов $N = N_\uparrow + N_\downarrow$ в объёме V с учётом (67), (68) определяет величину ε_F . Магнитный момент направлен вдоль магнитного поля и определяется как

$$\mathcal{M} = (N_\uparrow - N_\downarrow)\mu_0.$$

Учтём теперь, что энергия спина в магнитном поле мала по сравнению с энергией Ферми¹⁴ $\mu_0\mathcal{H} \ll \varepsilon_F$, и разложим $N_{\uparrow\downarrow}$ по $\mu_0\mathcal{H}/\varepsilon_F$ (учи-

¹⁴К тому же магнитная восприимчивость определяется как $\chi = \frac{\partial M}{\partial H}|_{H=0}$. Здесь $M = \mathcal{M}/V$ — намагниченность.

тывая, что при этом условии $N \propto \varepsilon_F^{3/2}$) :

$$N_{\uparrow\downarrow} = \frac{N}{2} \left(1 \pm \frac{3}{2} \frac{\mu_0 \mathcal{H}}{\varepsilon_F} \right).$$

Отсюда видно, что энергия Ферми при включении магнитного поля с точностью до $\mu_0 \mathcal{H}/\varepsilon_F$ включительно не изменяется. Магнитный момент

$$\mathcal{M} = \frac{3N\mu_0^2 \mathcal{H}}{2\varepsilon_F},$$

а магнитная восприимчивость

$$\chi = \frac{\mathcal{M}}{V\mathcal{H}} = \frac{3\mu_0^2 N}{2\varepsilon_F V}.$$

Это парамагнитная восприимчивость Паули. Для вырожденного электронного газа она оказалась много меньше, чем для больцмановского (с той же концентрацией), потому что фактически могут ориентироваться во внешнем поле только электроны, энергия которых близка к энергии Ферми.

Для вырожденного электронного газа, как и для больцмановского, парамагнитная восприимчивость на треть компенсируется диамагнетизмом Ландау, обусловленным орбитальным движением электронов, (см. подробнее в [1, § 59 - 60], [8, § 59]).

Задача 55. Показать, что Солнце – типичная горячая звезда – находится в устойчивом равновесии. Оценить температуру внутри Солнца. [42]

Решение:

Гравитационные силы в обычной звезде компенсируются давлением плазмы – газа заряженных частиц, а потери на излучение с поверхности – термоядерными реакциями: $4p \rightarrow {}^4He$ (точнее цепочкой реакций: $p + p \rightarrow D + e^+ + \nu$, $p + D \rightarrow {}^3He + \gamma$, ${}^3He + {}^3He \rightarrow {}^4He + 2p + \gamma$). Масса Солнца равна $M_\odot = 2 \cdot 10^{33}$ г, радиус $R_\odot = 7 \cdot 10^{10}$ см. Полная энергия складывается из гравитационной и тепловой

$$E = E_{\text{гр}} + E_{\text{теп}}, \quad (69)$$

где

$$E_{\text{гр}} = -K \frac{GM^2}{R}, \quad (70)$$

где G – гравитационная постоянная, M – масса звезды, R – ее радиус. Значение численного коэффициента $K \sim 1$ зависит от распределения плотности вещества по радиусу звезды и для дальнейших оценок этот и подобные ему коэффициенты будут опущены. Считая для простоты звезду водородной с числом протонов $N = M/m_p$, где m_p – масса протона (и равным числом электронов), для тепловой энергии имеем

$$E_{\text{теп}} = 3NT \quad (71)$$

Характерное время выравнивания давления гораздо меньше характерного времени изменения энтропии, связанного с потерями на излучение. Поэтому будем считать энтропию газа заряженных частиц постоянной. Выделяя в выражении для энтропии часть, зависящую от объема и температуры, получим

$$S = 2N \ln \left[\frac{eV}{N} T^{3/2} \right] = Const \quad (72)$$

откуда следует

$$VT^{3/2} \propto R^3 T^{3/2} = Const \rightarrow T = \frac{C}{R^2} \quad (73)$$

Таким образом

$$E = -\frac{GM^2}{R} + \frac{3CN}{R^2} \quad (74)$$

В равновесии, с учетом $S = Const$, минимальна полная энергия, что дает значение R_0 радиуса звезды

$$R_0 = \frac{GM^2}{6CN}, \quad (75)$$

тогда для температуры имеем

$$T \approx \frac{GMm_p}{R} \approx \frac{7 \cdot 10^{-8} \cdot 2 \cdot 10^{33} \cdot 1,6 \cdot 10^{-24}}{7 \cdot 10^{10}} \approx 3 \cdot 10^{-9} \text{ эрг} \approx 2 \cdot 10^7 \text{ }^0K \quad (76)$$

Температуру внутри Солнца можно оценить также по теореме вирiala – средняя потенциальная энергия (с обратным знаком) $\sim GM^2/R$ равна удвоенной кинетической $2NT$. Здесь следует поставить $N = 2M/m_p$, ... Таким образом, $T \sim Gm_p M/R$... Это достаточно естественная оценка: средняя кинетическая энергия, приходящаяся на один протон, порядка его же потенциальной.

Мы рассматривали плазму газ идеальный Больцмановский газ, т.е. пренебрегли Кулоновским взаимодействием по сравнению с тепловой энергией

$$\frac{e^2}{r_0} \ll T, \quad (77)$$

где r_0 – среднее расстояние между частицами

$$r_0 = \left(\frac{R^3}{N} \right)^{1/3} = R \left(\frac{m_p}{M} \right)^{1/3} \approx 10^{-8} \text{ см} \quad (78)$$

Легко проверить, что в данном случае условие идеальности выполняется

$$\frac{e^2}{r_0} \approx \frac{(4,8 \cdot 10^{-10})^2}{10^{-8}} \approx 2,5 \cdot 10^{-11} \text{ эрг} \ll T \approx 3 \cdot 10^{-9} \text{ эрг} \quad (79)$$

Задача 56. Когда в обычной звезде выгорает заметная часть водорода (превращаясь в гелий), термоядерная реакция прекращается и звезда, излучая, будет сжиматься. С повышением плотности газ электронов становится вырожденным. Сжатие останавливается благодаря тому, что гравитационные силы такой звезды будут компенсироваться давлением вырожденного электронного газа. Такая звезда, называется белым карликом. Оценить радиус белого карлика, масса которого равна $M \sim M_\odot$, где $M_\odot \sim 2 \cdot 10^{33} \text{ г}$ – масса Солнца.

Решение:
Кинетическая энергия частиц вырожденного электронного газа есть

$$E_{\text{кин}} \sim N_e \frac{\hbar^2}{m_e} \left(\frac{N_e}{V} \right)^{2/3} \sim \frac{\hbar^2 N_e^{5/3}}{m_e R^2}, \quad N_e \sim \frac{M}{2m_p}.$$

Из условия минимума полной энергии

$$E_{\text{полн}} \sim -\frac{GM^2}{R} + \frac{\hbar^2}{m_e R^2} \left(\frac{M}{2m_p} \right)^{5/3}$$

следует выражение для радиуса белого карлика

$$R_{\text{бк}} \sim \frac{\hbar^2}{G m_e m_p^{5/3} M^{1/3}} \approx 10^4 \text{ км.} \quad (80)$$

Обратим внимание на сходство с задачей 52.

Задача 57. Если звезда на начальной стадии имела массу, заметно большую массы Солнца, или масса белого карлика может увеличиваться за счет захвата(акреции) окружающего вещества, то вырожденный газ электронов может стать ультрарелятивистским. Оценить предельное значение массы белого карлика. [36]

Решение:

Энергия ультрарелятивистского ферми-газа определяется выражением

$$E_{\text{уп}} \approx N_e p_F c \approx \frac{\hbar c M^{4/3}}{R m_p^{5/3}}, \quad (81)$$

где p_F –импульс Ферми. Выражение для гравитационной энергии и энергии ультрарелятивистских электронов имеют одинаковую зависимость от радиуса звезды, а это означает, что при $E < 0$ звезда будет неограниченно сжиматься, т.е. у белого карлика есть предельное значение массы M_* , определяемое выражением

$$M_* \approx \frac{1}{m_p^2} \left(\frac{\hbar c}{G} \right)^{3/2} \approx \frac{1}{3 \cdot 10^{-48}} \left(\frac{10^{-27} 3 \cdot 10^{10}}{7 \cdot 10^{-8}} \right)^{3/2} \approx 3 \cdot 10^{33} \text{г} \quad (82)$$

Эту величину называют пределом Чандraseкара в честь индийского физика, впервые установившего существование предельного значения массы белого карлика.

Покажем законность пренебрежения кулоновским взаимодействием между заряженными частицами при таких больших плотностях. Для нерелятивистского электронного газа это условие имеет вид

$$\frac{e^2}{r_0} \approx e^2 \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3} \ll \varepsilon_0 \approx \frac{\hbar^2}{m_e} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3} \quad (83)$$

что эквивалентно

$$\begin{aligned} \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3} &\approx \left(\frac{M}{m_p R_{\text{бк}}^3} \right)^{1/3} \approx \left(\frac{2 \cdot 10^{33}}{1,6 \cdot 10^{-24} \cdot 10^{27}} \right)^{1/3} \approx 10^{10} \text{см}^{-1} \gg \\ &\gg \frac{e^2 m_e}{\hbar^2} = \frac{1}{a_B} \approx 10^8 \text{см}^{-1}. \end{aligned} \quad (84)$$

Для ультрарелятивистского случая условие идеальности принимает вид

$$\frac{e^2}{r_0} \approx e^2 \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3} \ll p_0 c \approx \hbar c \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3} \quad (85)$$

или

$$\frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \ll 1 \quad (86)$$

Задача 58. Если звезда на начальной стадии имела массу, заметно большую массы Солнца, или масса белого карлика может увеличиваться за счет захвата окружающего вещества, то энергия Ферми электронного газа может достичь порога реакции $e + p \rightarrow n + \nu$, ($\Delta m = m_n - m_p = 1,3$ МэВ), электронный газ при этом становится релятивистским, ($m_e = 0,511$ МэВ). Газы электронов и протонов почти совсем исчезают, нейтрино улетают. Звезда становится нейтронной (возможно, пульсаром). Найти соотношение между концентрациями электронов и нейтронов, считая их ультрарелятивистскими. [39, 36]

Решение:

Условие равновесия для реакции нейтронизации выглядит так

$$\mu_e + \mu_p = \mu_n \quad (87)$$

Вводя обозначения $x_i \equiv p_{oi}/(m_i c)$, это условие можно переписать в виде

$$m_e \sqrt{1 + x_e^2} + m_p \sqrt{1 + x_p^2} = m_n \sqrt{1 + x_n^2} \quad (88)$$

Условие электронейтральности звезды $N_e = N_p$ дает соотношение $x_p m_p = x_e m_e$.

Найдем плотность звезды при которой начинается нейтронизация вещества. В этом случае $x_n = 0$, $x_p \ll 1$ и

$$m_n - m_p \equiv Q = m_e \sqrt{1 + x_e^2} \rightarrow x_e = \sqrt{\left(\frac{Q}{m_e}\right)^2 - 1} \approx 2 \quad (89)$$

Тогда

$$\rho = m_p n_e = m_p \left(\frac{x_e m_e c}{\hbar (3\pi^2)^{1/3}} \right)^2 \approx 10^7 \text{ г/см}^3 \quad (90)$$

Конечной стадией процесса нейтронизации ядер является нейтронная звезда. В ультрарелятивистском случае все параметры $x_i \gg 1$, так что

$$m_e x_e + m_p x_p = 2m_p x_p \approx m_n x_n \rightarrow \frac{n_n}{n_p} \approx 2^3 = 8 \quad (91)$$

Радиус нейтронной звезды находится также как для белого карлика с заменой $m_e \rightarrow m_n$ (так как теперь гравитационные силы компенсируются давлением вырожденного нейтронного газа)

$$R_{\text{НЗ}} \approx \frac{\hbar^2}{Gm_p^{8/3}M^{1/3}} \approx \frac{m_e}{m_p} R_{\text{БК}} \approx 10 \text{ км} \quad (92)$$

Также как для белого карлика, для нейтронной звезды существует верхний предел массы

$$M_* \approx \frac{1}{m_p^2} \left(\frac{\hbar c}{G} \right)^{3/2} \approx 3 \cdot 10^{33} \text{ г} \quad (93)$$

7. Ферми-газ при ненулевой температуре

Задача 59. Качественно оценить теплоемкость и магнитную восприимчивость ферми-газа при низких температурах $T \ll \mu$.

Решение:

Средняя энергия, которую одна частица может “занять” у термостата $\approx T$, но не все ферми-частицы способны это сделать, т.к. увеличение их энергии для большинства невозможно ввиду того, что они должны попасть в уже занятое другими ферми-частицами энергетические состояния. Поэтому увеличить свою энергию на величину $\approx T$ могут лишь частицы, находящиеся вблизи поверхности Ферми в слое толщиной $\approx T$. Итак

$$\Delta E \approx TN_{\text{ЭФФ}} \approx TN \frac{T}{\mu} = \frac{NT^2}{\mu} \rightarrow C \approx N \frac{T}{\mu}. \quad (94)$$

Аналогично

$$\chi_{\text{пар}}^{\text{Ферми}} \approx \frac{\alpha^2}{T} \frac{NT}{\mu} = \frac{\alpha^2 N}{\mu}, \quad (95)$$

где α – магнитный момент частицы, а α^2/T – магнитная восприимчивость Больцмановского газа частиц.

Задача 60. Найти теплоемкость электронов в поле гармонического осциллятора. [8]

Решение:

Энергия частицы

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2}, \quad (96)$$

и переход от импульсных переменных к энергетическим осуществляется с использованием выражений

$$p^2 = 2m(\varepsilon - \frac{m\omega^2 r^2}{2}), \quad dp = \frac{\sqrt{2m}}{2} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon - \frac{m\omega^2 r^2}{2}}} \quad (97)$$

Тогда

$$\begin{aligned} N &= \int_0^\infty \int_0^\infty 2 \frac{4\pi p^2 dp 4\pi r^2 dr}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon - \mu)] + 1} = \\ &= \int_0^\infty \frac{d\varepsilon}{\exp[\beta(\varepsilon - \mu)] + 1} \int_0^{\sqrt{2\varepsilon/m\omega^2}} \frac{2(2m)^{3/2}}{\pi\hbar^3} \sqrt{\varepsilon - \frac{m\omega^2 r^2}{2}} r^2 dr = \\ &= A \int_0^\infty \frac{\varepsilon^2 d\varepsilon}{\exp[\beta(\varepsilon - \mu)] + 1}, \end{aligned} \quad (98)$$

где

$$A = \frac{(2m)^{3/2}}{\pi\hbar^3} \frac{2}{(m\omega^2/2)^{3/2}} \int_0^1 x^2 \sqrt{1-x^2} dx = \frac{1}{(\hbar\omega)^3}. \quad (99)$$

Аналогично

$$E = \frac{1}{(\hbar\omega)^3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^3 d\varepsilon}{\exp[\beta(\varepsilon - \mu)] + 1}. \quad (100)$$

Используем известное приближение для вычисления интегралов вида

$$I = \int_0^\infty \frac{g(\varepsilon) d\varepsilon}{\exp[\beta(\varepsilon - \mu)] + 1} \approx \int_0^\mu g(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2 T^2}{6} g'(\varepsilon = \mu), \quad (101)$$

применимое при условии $T \ll \mu$, получим

$$N \approx \frac{A\mu^3}{3} \left(1 + \frac{\pi^2 T^2}{\mu^2} \right), \quad E \approx \frac{A\mu^4}{4} \left(1 + \frac{2\pi^2 T^2}{\mu^2} \right). \quad (102)$$

Откуда

$$\frac{E}{N} \approx \frac{3\mu}{4} \left(1 + \frac{\pi^2 T^2}{\mu_0^2} \right), \quad (103)$$

где в последнем выражении в круглых скобках мы заменили $\mu \rightarrow \mu_0$, μ_0 – химический потенциал при нулевой температуре. Зависимость химического потенциала от температуры получается из условия постоянства числа частиц

$$N(T=0) = \frac{A\mu_0^3}{3} = \frac{A\mu^3}{3} \left(1 + \frac{\pi^2 T^2}{\mu_0^2} \right) \rightarrow \mu = \mu_0 \left(1 - \frac{\pi^2 T^2}{3\mu_0^2} \right), \quad (104)$$

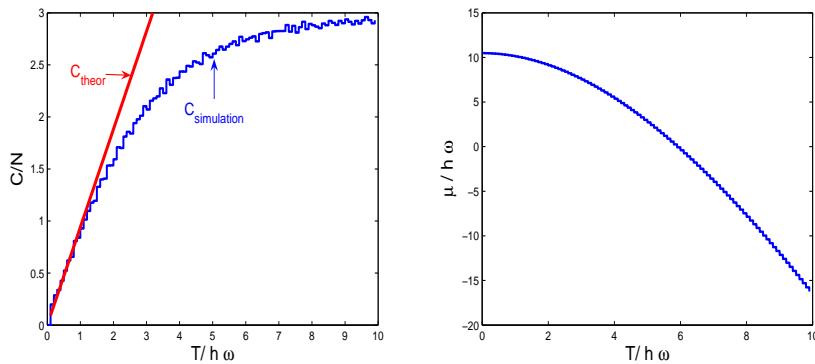


Рис. 14. Результаты численного моделирования зависимость теплоемкости и химического потенциала от температуры для трехмерного гармонического осциллятора. Приведено также теоретическое значение теплоемкости при низких температурах, формула (107)

где, используя (102),

$$\mu_0 = \hbar\omega (3N)^{1/3} \quad (105)$$

Подставляя эту формулу для химического потенциала в выражение для энергии, получим

$$E \approx \frac{3\mu_0}{4} \left(1 - \frac{\pi^2 T^2}{\mu_0^2}\right) \left(1 + \frac{2\pi^2 T^2}{\mu_0^2}\right) \approx \frac{3}{4} N \mu_0 + \frac{\pi^2 T^2}{2\mu_0} N \quad (106)$$

Следовательно теплоемкость электронов в поле гармонического осциллятора равна при низких температурах, рис. 14.

$$C \approx \frac{\pi^2 T}{\mu_0} N = \frac{\pi^2 T}{3^{1/3} \hbar\omega} N^{2/3} \quad (107)$$

В случае высоких температур химический потенциал становится отрицательным и большим по модулю по сравнению с температурой, так что в выражении для среднего числа заполнения уровней можно пренебречь единицей в знаменателе и распределение Ферми переходит в распределение Больцмана.

Тогда мы имеем

$$N = A e^{\beta\mu} \int_0^\infty \varepsilon^2 e^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon, \quad E = A e^{\beta\mu} \int_0^\infty \varepsilon^3 e^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon \quad (108)$$

Откуда

$$\frac{E}{N} = \frac{\int_0^\infty \varepsilon^2 e^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon}{\int_0^\infty \varepsilon^3 e^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon} = \left(-\frac{d}{d\beta} \right) \ln \left[\int_0^\infty \varepsilon^2 e^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon \right] = \frac{3}{\beta} \quad (109)$$

Таким образом

$$E = 3NT \rightarrow C = 3N \quad (110)$$

в случае высоких температур, как и должно быть для трехмерного гармонического осциллятора, рис. 14.

Примечание:

Приведенное выше решение применимо и для потенциалов другого вида. Однако, для потенциала гармонического осциллятора выражения для средней энергии и числа частиц можно получить гораздо быстрее, удобно принять $\varepsilon_n = \hbar\omega(n + 3/2)$, $g_n \approx 2n^2/2 = n^2$, так что

$$N = \sum_0^\infty g_n f(\varepsilon_n), \quad E = \sum_0^\infty \varepsilon_n g_n f(\varepsilon_n).$$

Переходя к интегрированию по $d\varepsilon = \hbar\omega dn$ (с $dn = 1$), получаем

$$N = 1/(\hbar\omega)^3 \int_0^\infty f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad E = 1/(\hbar\omega)^3 \int_0^\infty \varepsilon f(\varepsilon) d\varepsilon.$$

и т.д. Естественно, так же можно обойтись и с бозе-газом.

Задача 61. Найти квантовую поправку к давлению ферми-газа и теплоёмкости при постоянном объёме, считая газ слабо вырожденным.

Найти квантовую поправку к теплоёмкости при постоянном давлении для слабо вырожденного ферми-газа.

Решение:

Вспомним

$$\Omega = F - N\mu = F - \Phi = -PV, \quad d\Omega = -SdT - PdV - Nd\mu,$$

$$\Omega = -T \ln Q, \quad Q = \prod_k q_k, \quad q_k = 1 + e^{(\mu - \varepsilon_k)/T}, \quad \ln Q = \sum_k \ln q_k.$$

В случае слабо вырожденного газа $e^{(\mu - \varepsilon)/T} \ll 1$, так что

$$\ln q_k = e^{(\mu - \varepsilon_k)/T} - \frac{1}{2}e^{2(\mu - \varepsilon_k)/T},$$

$$\ln Q = e^{\mu/T} z(T) - \frac{1}{2} e^{2\mu/T} z(T/2),$$

$$z = \sum_k e^{-\varepsilon_k/T} = 2V \left(\frac{mT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}.$$

Итак,

$$PV = T \ln Q = Te^{\mu/T} z(T) \left(1 - e^{\mu/T} z(T/2)/2z(T) \right) =$$

$$= Te^{\mu/T} z(T) \left(1 - e^{\mu/T}/2^{5/2} \right) = -\Omega,$$

$$N = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = e^{\mu/T} z(T) \left(1 - 2e^{\mu/T}/2^{5/2} \right),$$

$$\frac{PV}{NT} = 1 + e^{\mu/T}/2^{5/2}.$$

Подставив в малую поправку $e^{\mu/T} = N/z(T)$ (как для больцмановского газа), получаем

$$\frac{PV}{NT} = 1 + \frac{N\hbar^3}{4V} \left(\frac{\pi}{mT} \right)^{3/2}. \quad (111)$$

Как и следовало ожидать, невозможность находиться двум и более электронам в одном и том же состоянии приводит к увеличению давления по сравнению с идеальным больцмановским газом.

Энергия нерелятивистского газа в заданном объеме связана с его давлением соотношением $E = (3/2)(PV/N)$. Из (111)

$$E = \frac{3}{2}NT \left(1 + \frac{N\hbar^3}{4V} \left(\frac{\pi}{mT} \right)^{3/2} \right),$$

а теплоёмкость

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \frac{3}{2}N \left(1 - \frac{N\hbar^3}{8V} \left(\frac{\pi}{mT} \right)^{3/2} \right).$$

Уменьшение теплоёмкости также можно качественно объяснить влиянием принципа Паули: количество состояний, в которые возможен переход, уменьшилось, и для нагревания газа это подобно уменьшению числа его частиц.

Для определения C_p воспользуемся известной формулой

$$C_p - C_v = -T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V^2 / \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T.$$

В итоге

$$C_P = \frac{5}{2}N \left(1 - \frac{11N\hbar^3}{40V} \left(\frac{\pi}{mT} \right)^{3/2} \right).$$

Решение (другой вариант):

Большая статсумма имеет вид

$$Q = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} e^{-\beta F} \approx e^{\beta\mu\bar{N}} e^{-\beta F(\bar{N})}. \quad (112)$$

Поскольку

$$\mu\bar{N} = F + PV \rightarrow Q = e^{PV/T} \quad (113)$$

то

$$PV = T \ln Q = T \sum_i \ln Q_i = T \sum_i \ln \left(1 + e^{\beta(\mu - \varepsilon_i)} \right). \quad (114)$$

При высоких температурах $e^{\beta\mu} \ll 1$, поэтому можно разложить логарифм и, переходя о суммирования к интегрированию, мы получим

$$\begin{aligned} PV &= T \int_0^{\infty} 2 \frac{V 4 \pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} \left[e^{\beta(\mu - \varepsilon)} - \frac{1}{2} e^{2\beta(\mu - \varepsilon)} \right] = \\ &= \frac{VT}{\pi^2\hbar^3} e^{\beta\mu} \frac{1}{4} \sqrt{\pi} (2mT)^{3/2} \left[1 - \frac{e^{\beta\mu}}{2 \cdot 2^{3/2}} \right]. \end{aligned} \quad (115)$$

Аналогично

$$N = \frac{V}{\pi^2\hbar^3} e^{\beta\mu} \frac{1}{4} \sqrt{\pi} (2mT)^{3/2} \left[1 - \frac{e^{\beta\mu}}{2^{3/2}} \right]. \quad (116)$$

Следовательно

$$\frac{PV}{N} = T \left[1 + \frac{e^{\beta\mu}}{2 \cdot 2^{3/2}} \right]. \quad (117)$$

В нулевом приближении

$$e^{\beta\mu} = \frac{4N}{V} \left(\frac{\pi\hbar^2}{2mT} \right)^{3/2}, \quad (118)$$

так что окончательно

$$PV = NT \left[1 + \frac{N}{4V} \left(\frac{\pi \hbar^2}{mT} \right)^{3/2} \right] \quad (119)$$

Как и следовало ожидать, невозможность находиться двум и более электронам в одном и том же состоянии приводит к увеличению давления по сравнению с идеальным больцмановским газом.

Изотермы для ферми-газа при малых плотностях лежат чуть выше изотерм бульцмановского газа, а при увеличении плотности переходят на универсальную кривую $P \propto V^{-5/3}$, характерную для вырожденного ферми-газа.

Задача 62. При каком давлении водород будет иметь плотность 10 кг/см³? На сколько изменится это давление, если температура поднимется от 300 К до 3000 К?

Задача 63. Электронный газ в металле обычно бывает сильно вырожденным ($T \ll \varepsilon_F \equiv \mu$). Поэтому часто оказывается удобным рассматривать вместо газа свободных электронов газ квазичастиц — электронов и дырок с энергией, отсчитываемой от уровня Ферми: $\epsilon(\mathbf{p}) = |\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu| = v_0 |p - p_0|$. Здесь $v_0 = p_0/m$, $p = |\mathbf{p}|$. (При $p > p_0$ это электроны, при $p < p_0$ — дырки.)

Найти отношение числа квазичастиц электронного газа к числу частиц.

Решение:

$$3 \ln 2 \cdot (T/\mu), \quad \mu = p_0 v_0 / 2.$$

При вычислении можно принять $d^3 p = 4\pi p_0^2 dp$ и при этом суммировать вклады электронов и дырок. (Подробнее об электронах и дырках в металлах см., например, [17, § 2.2].)

Заметим, что определения дырок в полупроводнике и в металле различны.

Задача 64. Кусок металла представляет собой катод в электровакуумном приборе. Этот кусок металла представляет собой для электронного газа потенциальную яму с крутыми стенками. Расстояние от уровня Ферми электронного газа до верхнего уровня ямы A — работа выхода. Катод нагрет до температуры T , такой что $A \gg T$, так что лишь небольшая доля электронов может покидать металл. К металлу приложено напряжение, мало изменяющее эту потенциальную яму, но достаточное для того, чтобы все электроны, покинувшие катод достигали анода (образуется ток насыщения).

Определить зависимость тока насыщения от температуры.

Решение:

Обратим внимание на сходство задачи с задачей 35.

При наличии достаточного напряжения возникает ток насыщения, определяемый потоком электронов из металла. Этот поток можно считать таким же, как в отсутствие напряжения между катодом и анодом, когда вне металла есть газ электронов, находящийся в равновесии с электронным газом в металле. Удобно рассчитать именно поток электронов в металле в таких условиях. Химические потенциалы электронных газов вне и внутри металла совпадают. Если вести отсчет от уровня, отвечающего покоящейся частице вне металла, то $\mu = -A$. Обычно $A \gg T$, так что газ вне металла оказывается больцмановским. Мы будем считать его идеальным. Его концентрация

$$n_0 = \frac{N}{V} = e^{\mu/T} z/V = 2e^{-A/T} \left(\frac{mT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}$$

(см. задачу 61). Плотность потока частиц, вылетающих из металла, в равновесии равна плотности потока частиц, падающих на него. Она была найдена в задаче 35:

$$j = \frac{n_0}{2} \sqrt{\frac{T}{2\pi m}}.$$

Главная зависимость от температуры содержится в экспоненте (в $n_0(T)$).

Может возникнуть впечатление, что из задачи выпал вопрос о сложном законе дисперсии электронов в металле $\epsilon(\mathbf{p})$. Но совсем не так: появляется равносильно сложный вопрос о коэффициенте конденсации (вероятности прилипания электрона при ударе о поверхность металла). Например, для электрона, энергия которого попала в запрещенную зону внутри металла, коэффициент отражения равен единице. Так что предложенное решение нельзя считать вполне корректным для реальных металлов.

Можно вспомнить также, что при меньших напряжениях существенным оказывается влияние на ток объемного заряда. В условиях же, когда все электроны удаляются от катода, объемного заряда нет и расчёт с гипотетическим идеальным газом является разумным.

Задача 65. Микросостояние идеального газа можно задать, указав, сколько частиц находится в каждом возможном для частицы состоянии. Объединим „близкие“, в частности, имеющие одинаковые энергии,

состояния в большие группы по $G_i \gg 1$ частиц в каждой. Задав число частиц N_i в каждой из групп, мы определяем макросостояние газа, вообще говоря, неравновесное.

Найти энтропию такого состояния для ферми-газа и выразить её через числа заполнения групп состояний $f_i = N_i/G_i$ и G_i .

Найти числа заполнения, отвечающие максимуму энтропии при фиксированных значениях полного числа частиц и полной энергии газа. Найти среднее квадратичное отклонение чисел заполнения от максимального значения. [1, § 55].

Решение:

Число способов распределения N_i частиц по G_i состояниям есть

$$\Gamma_i = \frac{G_i!}{N_i!(G_i - N_i)!}.$$

Тогда энтропия равна

$$S = \sum_i G_i [f_i \ln f_i + (1 - f_i) \ln (1 - f_i)].$$

Суммируются вклады электронов и дырок. Максимуму энтропии отвечает распределение Ферми – Дирака. Среднеквадратичное отклонение чисел заполнения есть

$$\langle (\Delta f_i)^2 \rangle = - \left(\frac{\partial^2 S}{\partial f_i^2} \right)_{\sum G_i f_i, \sum \varepsilon G_i f_i}^{-1} = f_i(1 - f_i)$$

Задача 66. Столб слабо вырожденного ферми-газа находится в однородном поле тяжести. Найти квантовые поправки к его теплоёмкости и высоте центра масс.

Указание. Удобно воспользоваться разложением по малой величине $r = e^{\mu/T}$.

Задача 67. Найти зависимость плотности и давления вырожденного ферми-газа в поле тяжести от высоты при $T = 0$.

Решение:

Как видно из постановки вопроса, подразумевается, что на каждой высоте достигнуто локальное равновесие газа.

Границный импульс и граничная кинетическая энергия фермионов на данной высоте связаны с плотностью газа на этой высоте: $p_0 = (3\pi^2)^{1/3} \hbar n^{1/3}$, $\varepsilon_0 = p_0^2/2m = A n^{2/3}$, давление $P = \frac{2}{5} n \varepsilon_0$.

Можно было бы воспроизвести вывод барометрической формулы, знакомый по курсу общей физики, стартуя от равенства $dP = -mngdx$.

Другой способ — записать равенство $\mu = \mu(x)$, где μ — химический потенциал ферми-газа, а $\mu(x) = \varepsilon_0 + mgx$ — локальное значение химического потенциала, складывающееся из граничного значения кинетической энергии и потенциальной энергии. Это сразу же даёт

$$n = [(\mu - mgx)/A]^{3/2} = (mg/A)^{3/2}(x_{max} - x)^{3/2}.$$

Здесь $x_{max} = \mu/mg$ — высота столба газа. Химический потенциал связан с полным числом фермионов в столбе газа единичного сечения N условием $N = \int_0^{x_{max}} n dx = \frac{2}{5} \left(\frac{mg}{A}\right)^{3/2} x_{max}^{5/2}$.

Естественно считать, что температура мала, но не равна нулю. Тогда при высотах, близких к x_{max} , условие $\mu(x) \gg T$ будет нарушено, газ перестанет быть вырожденным, а при $x > x_{max}$ в зависимости $n(x)$ появится „хвост“ в виде распределения Больцмана.

8. Полупроводники

Задача 68. Если в полупроводник IV группы (Ge, Si) ввести в небольшом количестве атомы V группы (P, As, Sb), то их четыре электрона образуют валентные связи с Ge, Si , а один электрон остается слабо связанным, энергия связи $\Delta - E_d \sim 0,01 - 0,03\text{эВ}$, и он легко может перепрыгнуть в зону проводимости уже при температуре $T \sim 300^\circ K$. Легированные таким образом полупроводники называют донорными или n -типа. Найти зависимость химического потенциала и числа носителей заряда в зоне проводимости в зависимости от температуры. [44, 9]

Решение:

Найдем прежде всего среднее число заполнения донорных уровней. На одном донорном уровне электроны могут располагаться по одному (со спином либо вверх либо вниз), но не два одновременно т.к. из-за кулоновского отталкивания энергия такого состояния сильно возрастает. В этом случае большая статсумма для i -го донорного уровня есть

$$Q_i = \sum_{n_i} e^{\beta(\mu - \varepsilon_i)n_i} = 1 + 2e^{\beta(\mu - E_d)}. \quad (120)$$

Среднее число заполнения донорного уровня находится из

$$n_d = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Q_i}{\partial E_d} = \frac{2e^{\beta(\mu - E_d)}}{1 + 2e^{\beta(\mu - E_d)}}, \quad (121)$$

а число ионизованных (отдавших электроны) донорных атомов N_d^+ равно

$$N_d^+ = (1 - n_d)N_d = \frac{N_d}{1 + 2e^{\beta(\mu - E_d)}}, \quad (122)$$

где N_d – полное число донорных атомов. Теперь число электронов в зоне проводимости складывается из числа электронов, перепрыгнувших из валентной зоны и электронов, поставляемых донорными атомами, именно

$$N_e = N_h + \frac{N_d}{1 + 2e^{\beta(\mu - E_d)}}. \quad (123)$$

При температуре $T \ll \Delta \approx 1\text{эВ} \approx 12000^\circ K$ вероятность создания электрон-дырочной пары мала, т.е. малы средние числа заполнения для электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне, для чего необходимо выполнение условий $e^{\beta\mu} \gg 1$, $e^{\beta(\Delta-\mu)} \gg 1$. В этом случае получается бульмановское распределение, так что мы имеем следующие выражения для числа электронов в зоне проводимости N_e и числа дырок в валентной зоне N_h

$$N_e = V e^{-\beta(\Delta-\mu)} \int 2 \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} e^{-p^2/2m_e T} = 2V \left(\frac{m_e T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\beta(\Delta-\mu)} \equiv N_c e^{-\beta(\Delta-\mu)}, \quad (124)$$

$$N_h = V e^{-\beta\mu} \int 2 \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} e^{-p^2/2m_h T} = 2V \left(\frac{m_h T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\beta\mu} \equiv N_v e^{-\beta\mu} \quad (125)$$

Тогда получаем уравнение на химический потенциал

$$N_c e^{-\beta(\Delta-\mu)} = N_v e^{-\beta\mu} + \frac{N_d}{1 + 2e^{\beta(\mu - E_d)}}. \quad (126)$$

При достаточно низких температурах, таких что $e^{\beta(\mu - E_d)} \gg 1$, основным поставщиком электронов в зону проводимости будут донорные атомы, поэтому

$$N_c e^{-\beta(\Delta-\mu)} \approx \frac{N_d}{2e^{\beta(\mu - E_d)}}, \quad (127)$$

откуда

$$e^{2\beta\mu} = \frac{N_d}{2N_c} e^{\beta(\Delta+E_d)}, \quad (128)$$

что дает

$$\mu = \frac{\Delta + E_d}{2} + \frac{T}{2} \ln \left(\frac{N_d}{2N_c} \right), \quad (129)$$

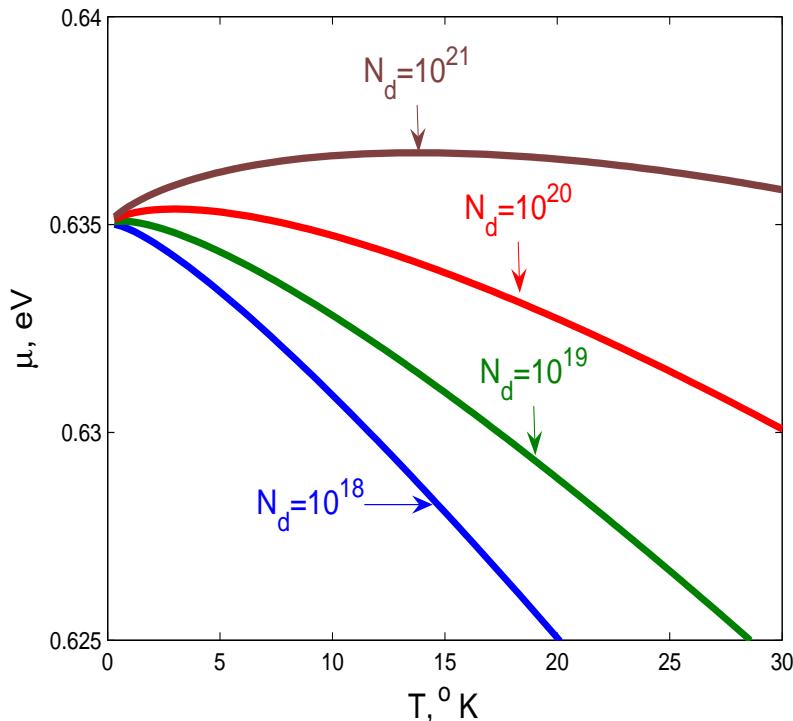


Рис. 15. Зависимость химического потенциала μ для германия от температуры при различных значениях концентрации донорных примесей. $\Delta = 0.65$ еВ, $E_d = 0.62$ еВ, $N_c(T = 300^\circ\text{K}) = 4 \cdot 10^{21} \text{cm}^{-3}$.

$$N_e = \frac{N_d}{2} e^{-\beta\mu} e^{\beta E_d} = \sqrt{\frac{N_d}{N_c}} e^{-\beta \frac{\Delta+E_d}{2}}. \quad (130)$$

Как и для собственных полупроводников, в этом температурном режиме число носителей заряда очень сильно зависит от температуры. При $T = 0$ химический потенциал $\mu = (\Delta + E_d)/2$. Интересно, что с повышением температуры химический потенциал сначала растет, рис. 15, достигая максимума, находимого из условия

$$\frac{d\mu}{dT} = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{N_d}{2N_c} \right) + \frac{T}{2} \left(-\frac{3}{2} \frac{1}{T} \right) = 0 \rightarrow \frac{N_d}{2N_c} = e^{3/2}. \quad (131)$$

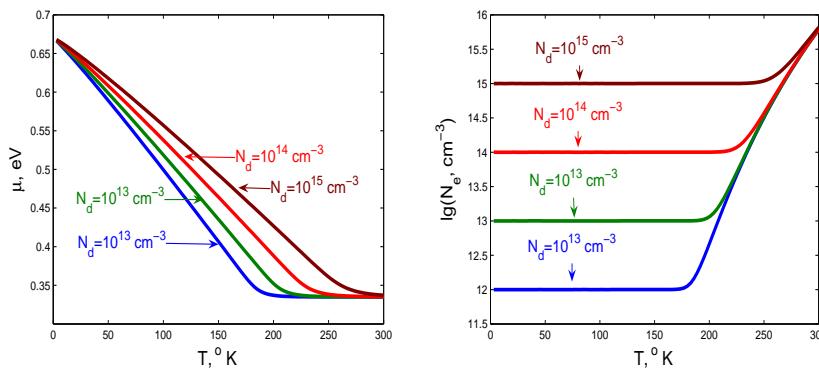


Рис. 16. Зависимость химического потенциала и концентрации электронов в зоне проводимости для германия при различной концентрации донорных примесей.

Подставляя значение N_c , получим

$$T_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{m_e e} \left(\frac{N_d}{4V} \right)^{2/3}, \quad \mu_0 = \frac{\Delta + E_d}{2} + \frac{3\pi\hbar^2}{2m_e e} \left(\frac{N_d}{4V} \right)^{2/3}. \quad (132)$$

(Отметим, что в этих формулах e – основание натурального логарифма, а не заряд электрона!)

Из выражения для μ_0 следует, что с увеличением числа донорных атомов N_d может случиться, что μ_0 станет больше Δ , т.е. уровень Ферми “влезет” в зону проводимости и получится “металл точнее вырожденный полупроводник”.

В другом температурном режиме $e^{\beta(\mu - E_d)} \ll 1$ следует учесть вклад дырок из валентной зоны (при этом все донорные уровни пусты):

$$N_c e^{\beta(\mu - \Delta)} = N_v e^{-\beta\mu} + N_d, \quad (133)$$

откуда, решая квадратное уравнение, получим

$$e^{\beta\mu} = \frac{N_d + \sqrt{4N_c N_v e^{-\beta\Delta} + N_d^2}}{2N_c e^{-\beta\Delta}}. \quad (134)$$

Перед корнем выбран знак плюс, поскольку $e^{\beta\mu} > 0$.

Если температура не очень большая, $N_d^2 \gg 4N_c N_v e^{-\beta\Delta}$, то

$$\mu = \Delta + \ln \frac{N_d}{N_c}, \quad N_e = N_c e^{\beta(\mu - \Delta)} = N_d = \text{Const}$$

Это как раз тот температурный режим, в котором работает большинство полупроводниковых приборов.

При дальнейшем повышении температуры, когда $N_d^2 \ll 4N_c N_v e^{-\beta\Delta}$, восстанавливается режим собственной проводимости, рис. 16

$$e^{\beta\mu} = \sqrt{\frac{N_v}{N_c}} e^{\beta\Delta/2} \rightarrow \mu = \frac{\Delta}{2} + \frac{3}{4} T \ln \frac{m_h}{m_e}$$

Задача 69. Найти теплоёмкость газа электронов и дырок в чистом полупроводнике.

Решение:

Учтем, что электроны и дырки подчиняются распределению Больцмана, причем количества их одинаковы и $N_e = N_h \propto T^{3/2} e^{-\Delta/2T}$ (Δ – ширина запрещенной зоны). Энергия газа электронов и дырок $E = N_e(\Delta + 3T)$. Теплоёмкость $C = \frac{dE}{dT}$. Учитывая, что $\Delta \gg T$, получаем $C = N_e \frac{\Delta^2}{2T^2} \left(1 + O\left(\frac{T}{\Delta}\right)\right)$.

9. Бозе-газ во внешнем поле

Задача 70. Найти связь среднего числа и средней энергии с химическим потенциалом для d -мерного бозе-газа. Чему равна температура Бозе-Эйнштейновской конденсации?

Решение:

Статсумма для бозе частиц имеет вид

$$Q = \prod_i Q_i = \prod_i \sum_{n_i=0}^{\infty} \exp [\beta(\mu - \varepsilon_i)] = \prod_i \frac{1}{1 - \exp [\beta(\mu - \varepsilon_i)]} \quad (135)$$

Тогда среднее число частиц на уровне i

$$\bar{n}_i = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_i} \ln Q_i = \frac{1}{\exp [\beta(\varepsilon_i - \mu)] - 1} \quad (136)$$

Важно заметить, что поскольку $\bar{n}_i \geq 0$, то $\mu \leq \min \varepsilon_i$. Переходя как обычно от суммирования по всем уровням энергии к интегрированию по

фазовому пространству, мы записываем выражения для полного числа частиц N и средней энергии системы E

$$N = \sum_i \bar{n}_i = V \int \frac{d^d p}{(2\pi\hbar)^d} \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon_i - \mu)] - 1}, \quad (137)$$

$$E = \sum_i \bar{n}_i \varepsilon_i = V \int \frac{d^d p}{(2\pi\hbar)^d} \frac{\varepsilon}{\exp[\beta(\varepsilon_i - \mu)] - 1} \quad (138)$$

Температура бозе-конденсации T_0 находится из условия $N(T_0, \mu = 0) = N_0$ – числу частиц в системе. Видно, что для $d \leq 2$ если положить в интеграле для N значение химического потенциала $\mu = 0$, то интеграл расходится на нижнем пределе. Это означает, что температура бозе-конденсации равна нулю.

Задача 71. Бозе-газ находится в поле $U = m\omega^2 r^2/2$. Найти температуру T_k конденсации Бозе – Эйнштейна, теплоёмкость при $T < T_k$ и скачок теплоёмкости в точке конденсации.

Решение:

Воспользуемся тем, что уровни энергии частицы в данном поле и кратности их вырождения хорошо известны:

$$\varepsilon_n = \hbar\omega(n + 3/2), \quad g_n = C_{n+2}^2 \approx n^2/2.$$

В уравнении

$$N = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{g_n}{e^{(\varepsilon_n - \mu)/T} - 1},$$

позволяющем найти температуру конденсации Бозе – Эйнштейна T_k и химический потенциал при $T > T_k$, можно перейти к интегрированию по n , а затем и по $x = \hbar\omega n/T$:¹⁵

$$N = \frac{1}{2} \left(\frac{T}{\hbar\omega} \right)^3 b_2(y), \quad y = \frac{3\hbar\omega/2 - \mu}{T}. \quad (139)$$

Температура конденсации достигается, когда химический потенциал имеет максимально возможное значение, что отвечает условию $y = 0$:

$$N = \frac{1}{2} \left(\frac{T_k}{\hbar\omega} \right)^3 b_2(0), \quad T_k = \hbar\omega \left(\frac{2N}{b_2(0)} \right)^{1/3}.$$

¹⁵Функция $b_a(y)$ введена в Математическом дополнении.

Энергия газа

$$E = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{g_n \varepsilon_n}{e^{(\varepsilon_n - \mu)/T} - 1} = N \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{T^4}{2(\hbar\omega)^3} b_3(y). \quad (140)$$

Теплоёмкость $C = \frac{dE}{dT}$. При $T < T_k$ выполняется условие $y = 0$, в этом случае

$$\begin{aligned} C &= 2 \left(\frac{T}{\hbar\omega} \right)^3 b_3(0) = 4N \left(\frac{T}{T_k} \right)^3 \frac{b_3(0)}{b_2(0)} = \\ &= 12N \left(\frac{T}{T_k} \right)^3 \frac{\zeta(4)}{\zeta(3)} = 10,8N \left(\frac{T}{T_k} \right)^3. \end{aligned}$$

При $T > T_k$ необходимо учесть зависимость y от T :

$$C = 2 \left(\frac{T}{\hbar\omega} \right)^3 b_3(y) - \frac{3}{2} \frac{T^4}{(\hbar\omega)^3} b_2(y) \frac{dy}{dT}, \quad (141)$$

Производную $\frac{dy}{dT}$ находим, продифференцировав уравнение (139) по T (удобно его предварительно прологарифмировать):

$$\frac{3}{T} - \frac{2b_1(y)}{b_2(y)} \frac{dy}{dT} = 0. \quad (142)$$

Подставив $\frac{dy}{dT}$ из (142) в (141), получаем

$$C = 2 \left(\frac{T}{\hbar\omega} \right)^3 b_3(y) - \frac{9}{4} \left(\frac{T}{\hbar\omega} \right)^3 \frac{b_2^2(y)}{b_1(y)}.$$

Скачок теплоёмкости при $T = T_k$

$$\Delta C = -\frac{9}{4} \left(\frac{T_k}{\hbar\omega} \right)^3 \frac{b_2^2(0)}{b_1(0)} = -\frac{9}{2} \frac{b_2(0)}{b_1(0)} N = -9 \frac{\zeta(3)}{\zeta(2)} N = -6,58 N.$$

На рис. 17 приведена зависимость $C(T)$, найденная численно.

Задача 72. Для бозе-газа в заданном объеме найти скачок величины $\left(\frac{\partial C_V}{\partial T} \right)_V$ при температуре конденсации Бозе – Эйнштейна.

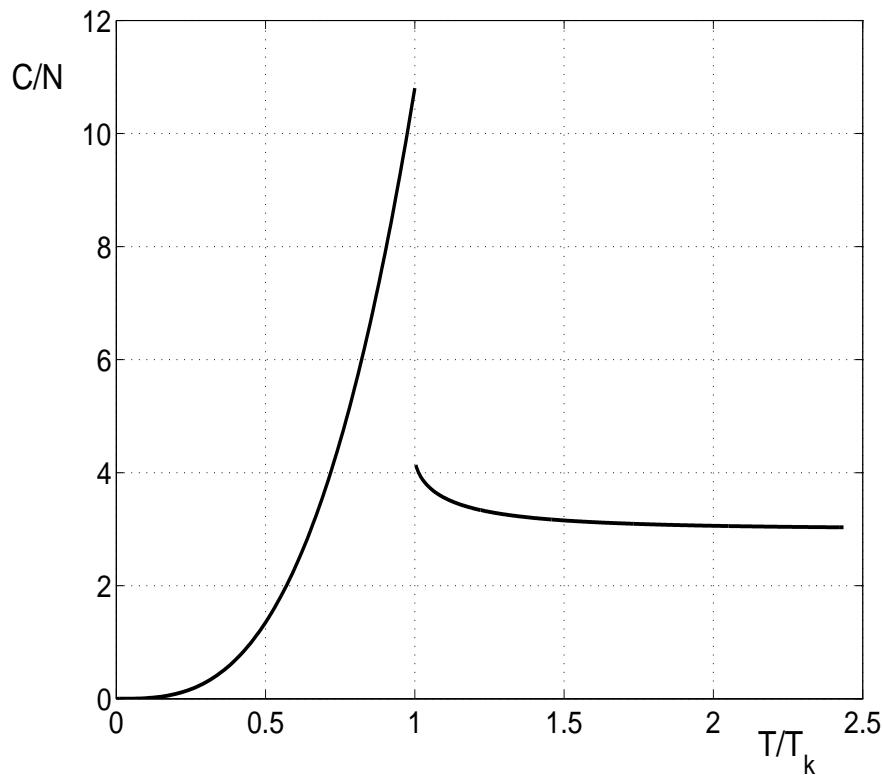


Рис. 17. Теплоёмкость бозе-газа в поле $U = m\omega^2 r^2 / 2$

Решение:
Ответ. $\Delta \left(\frac{\partial C_V}{\partial T} \right)_V = -\frac{27}{16\pi} \zeta^2 \left(\frac{3}{2} \right) \frac{N}{T_k} = -3,67 \frac{N}{T_k}$.

Задача 73. Бозе-газ находится в поле

$$U(z) = \begin{cases} Fz & \text{при } z > 0, \\ \infty & \text{при } z < 0. \end{cases}$$

Найти температуру T_k конденсации Бозе – Эйнштейна, теплоёмкость при $T < T_k$, скачок теплоёмкости в точке конденсации, высоту центра тяжести газа $\langle z \rangle$ и скачок величины $\frac{\partial \langle z \rangle}{\partial T}$.

Решение:

Будем рассматривать столб газа единичной площади сечения. Распределение частиц по импульсам и по высоте

$$f(\varepsilon(z, p)) = f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/T} - 1}, \quad \varepsilon = \frac{p^2}{2m} + U(z).$$

Химический потенциал определяется равенством

$$N = \int f(\varepsilon(z, p)) \frac{dz d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = \int_0^\infty dz \int_0^\infty dp \frac{4\pi p^2}{(2\pi\hbar)^3} f(\varepsilon(z, p)).$$

Удобно перейти от интегрирования по z к интегрированию по ε , после чего интеграл по p легко вычисляется:

$$\begin{aligned} N &= \int_0^\infty d\varepsilon \int_0^{\sqrt{2m\varepsilon}} \frac{p^2 dp}{dU/dz} \frac{f(\varepsilon)}{2\pi^2 \hbar^3} = \\ &= \int_0^\infty d\varepsilon \frac{(2m\varepsilon)^{3/2} f(\varepsilon)}{6\pi^2 \hbar^3 F} = \frac{(2m)^{3/2} T^{5/2}}{6\pi^2 \hbar^3 F} b_{3/2}(y), \end{aligned} \quad (143)$$

где $y = -\mu/T$. Температура T_k конденсации Бозе – Эйнштейна определяется условием $y = 0$.

$$T_k = \left[\frac{6\pi^2 \hbar^3 F N}{(2m)^{3/2} b_{3/2}(0)} \right]^{2/5}, \quad T_k \approx \frac{2\hbar^{1.2} F^{0.4} N^{0.4}}{m^{0.6}}.$$

Задача 74. Бозе-газ находится в поле

$$U(z) = \begin{cases} mgz & \text{при } z > 0, \\ \infty & \text{при } z < 0. \end{cases}$$

Найти давление $P(z)$.

Решение:

Число частиц газа в столбе единичного сечения

$$N = A \int \frac{\sqrt{\varepsilon_k} d\varepsilon_k dz}{e^{\beta(\varepsilon_k + mgz) + y} - 1} = AT^{3/2} \int_0^\infty b_{1/2}(y + mgz/T) dz,$$

где $\varepsilon_k = p^2/2m$ – кинетическая энергия, $y = -\mu/T$. Используя формулу (445) из Математического дополнения, получим

$$N = \frac{2AT^{5/2}}{3mg} b_{3/2}(y),$$

Давление $P(z)$ выражаем через среднюю энергию бозе частиц на высоте z

$$P(z) = \frac{2}{3} A \int \frac{\varepsilon_k^{3/2} d\varepsilon_k}{e^{\beta(\varepsilon_k + mgz) + y} - 1} = \frac{2}{3} AT^{5/2} b_{3/2}(y + mgz/T).$$

При $z = 0$ получаем, как и следовало ожидать, $P(0) = mgN$. При $T < T_k$ имеем

$$P(z) = \frac{2}{3} AT^{5/2} b_{3/2}(mgz/T).$$

Задача 75. Для бозе-газа в центральном поле $U(r) = Ar^n$ найти скачок величины теплоёмкости при температуре конденсации Бозе – Эйнштейна.

Решение:

Если $n < 6$, то $\Delta C = -Ns^2\zeta(s)/\zeta(s-1)$, где $s = 3/n + 3/2$.

Если $n > 6$, то $\Delta C = 0$, $dC/dT \rightarrow -\infty$ при $T \rightarrow T_k + 0$.

Задача 76. Изобразить изотермы бозе-газа на PV плоскости.

Решение:

Давление любого нерелятивистского идеального газа с изотропным распределением по скоростям может быть выражено через плотность энергии: $P = \frac{2E}{3V}$. Для бозе-газа

$$P = \frac{2}{3} AT^{5/2} b_{3/2}(y), \quad y = -\frac{\mu}{T}. \quad (144)$$

Величина y , связанная с химическим потенциалом газа, определяется из уравнения

$$N = AVT^{3/2} b_{1/2}(y) + N_0. \quad (145)$$

Графический анализ его решения представлен на рис.14.

Уравнения (144),(145) определяют уравнение изотермы в параметрическом виде ($0 < y < \infty$, см. рис.15).

При уменьшении объема V при постоянной температуре величина y в (145) достигает максимального возможного значения, $y = 0$. Это точка бозе-конденсации,

$$V = V_k \equiv V|_{y=0}, \quad P = P_k \equiv P|_{y=0}.$$

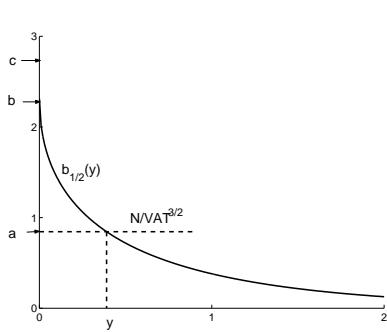
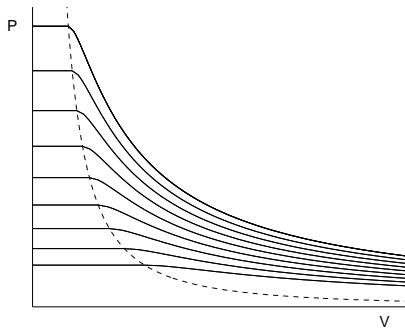
Рис. 18. Графическое решение уравнения, определяющего y 

Рис. 19. Изотермы бозе-газа. Пунктирная линия — линия фазового перехода

Исключив из этих уравнений T , получаем линию фазового перехода на PV плоскости:

$$P_k V_k^{5/3} = \frac{2b_{3/2}(0)N^{5/3}}{3b_{1/2}^{5/3}(0)A^{2/3}}. \quad (146)$$

При $V < V_k$ в (144) $y = 0$ (а в (145) еще и $N_0 > 0$), — давление остается постоянным и равным P_k .

Вблизи линии фазового перехода ($V - V_k \ll V_k$, $y \ll 1$)

$$b_{3/2}(y) = b_{3/2}(0) - \frac{3}{2}b_{1/2}(0)y,$$

$$b_{1/2}(y) = b_{1/2}(0) - \pi\sqrt{y}.$$

С учетом этого

$$\frac{P - P_k}{P_k} = -\frac{3b_{1/2}(0)y}{2b_{3/2}(0)}, \quad \frac{V - V_k}{V_k} = \frac{\pi\sqrt{y}}{b_{1/2}(0)},$$

так что

$$\frac{P - P_k}{P_k} = -\frac{3b_{1/2}^2(0)}{2\pi^2 b_{3/2}(0)} \left(\frac{V - V_k}{V_k}\right)^2.$$

Изотерма пересекает линию фазового перехода без излома.

Задача 77. Найти соотношение между концентрациями электронов, позитронов и фотонов и соотношение между их энергиями при

температуре $T \gg m_e c^2$ (такая высокая температура была в малые доли секунды после *Большого взрыва*; в этих условиях можно принять, что концентрации электронов и позитронов одинаковы).

Решение:

Равновесные значения числа частиц в указанной реакции определяются условиями $\mu_{e+} + \mu_{e-} = 2\mu_\gamma = 0$. При температуре $T \gg m_e c^2$ концентрации электронов и позитронов во много раз превышают концентрацию частиц при исходных („земных“) условиях, поэтому можно пренебречь различием концентраций частиц и античастиц. Равенство концентраций электронов и позитронов дает $\mu_{e+} = \mu_{e-} = 0$. Учитывая также, что почти все электроны и позитроны в этих условиях являются ультрарелятивистскими, получаем

$$\begin{aligned} N_{e^-} &= V \int_0^\infty 2 \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\exp(pc/T) + 1} = \frac{V}{\pi^2} \left(\frac{T}{\hbar c}\right)^3 f_2(0), \\ E_{e^-} &= \frac{VT}{\pi^2} \left(\frac{T}{\hbar c}\right)^3 f_3(0), \\ N_\gamma &= \frac{V}{\pi^2} \left(\frac{T}{\hbar c}\right)^3 b_2(0), \quad E_\gamma = \frac{VT}{\pi^2} \left(\frac{T}{\hbar c}\right)^3 b_3(0), \end{aligned}$$

где функции b_a , f_a определены в дополнении С. Интегралы $f_n(0)$ и $b_n(0)$ связаны простым соотношением $f_n(0) = (1 - 2^{-n})b_n(0)$. Следовательно,

$$\frac{N_{e^-}}{N_\gamma} = \frac{3}{4}, \quad \frac{E_{e^-}}{E_\gamma} = \frac{7}{8}.$$

Интересно, что в данной равновесной системе средние энергии, приходящиеся на один электрон (или позитрон) и на один фотон, не совпадают. Заметим также, что парциальные давления ультрарелятивистских газов оцениваются как $P_i = E_i/3V \sim n_i T$. А точнее, например, для фотонного газа

$$P_\gamma = (\pi^4/(90\zeta(3))n_\gamma T = 0,9 n_\gamma T,$$

для электронного —

$$P_e = 1,05 n_e T.$$

Задача 78. Микросостояние идеального газа можно задать, указав, сколько частиц находится в каждом возможном для частицы состоянии. Объединим „близкие“, в частности, имеющие одинаковые энергии,

состояния в большие группы по $G_i \gg 1$ частиц в каждой. Задав число частиц N_i в каждой из групп, мы определяем макросостояние газа, вообще говоря, неравновесное.

Найти энтропию такого состояния для бозе-газа и выразить её через числа заполнения групп состояний $f_i = N_i/G_i$ и G_i .

Найти числа заполнения, отвечающие максимуму энтропии при фиксированных значениях полного числа частиц и полной энергии газа. Найти среднее квадратичное отклонение чисел заполнения от максимального значения. [1, § 55].

Решение:

Число способов распределения N_i частиц по G_i состояниям, с учетом, что в каждом состоянии может находиться любое число частиц, есть

$$\Gamma_i = \frac{(G_i + N_i - 1)!}{N_i!(G_i - 1)!}.$$

При условии $N_i \gg 1, G_i \gg 1$ энтропия равна

$$S = \sum_i G_i [(1 + f_i) \ln(1 + f_i) - f_i \ln(f_i)].$$

Максимуму энтропии отвечает распределение Бозе – Эйнштейна. Среднеквадратичное отклонение чисел заполнения есть

$$\langle (\Delta f_i)^2 \rangle = - \left(\frac{\partial^2 S}{\partial f_i^2} \right)_{\sum G_i f_i, \sum \varepsilon G_i f_i}^{-1} = f_i(1 + f_i)$$

10. Фотоны. Фононы

Задача 79. Насколько изменится скорость звука $c_S^2 = (\partial P / \partial \rho)_S$ в газе заряженных частиц с плотностью n и массой m за счет присутствия фотонов, находящихся в равновесии при температуре $T \ll mc^2$.

Газ нагрет до такой высокой температуры, что количество фотонов, находящихся с ним в равновесии, стало сравнимо с количеством частиц газа. (Такие условия выполняются в глубине Солнца). Найти скорость звука в этой смеси газов, $c_s^2 = (\partial P / \partial \varrho)_S$. Температура $T \ll mc^2$ (m – масса частицы газа, c – скорость света).

Решение:

Рассмотрим сначала предельный случай, когда газ настолько разрежен, что его плотность $n \ll n_\gamma$, плотности числа фотонов (такие условия

выполнялись в ранней Вселенной). При этих условиях основной вклад в давление и энтропию вносят фотоны ([6, § 65, задача 2])

$$P_\gamma \sim Tn_\gamma \gg nT, \quad S_\gamma \sim n_\gamma V \gg S_{\text{частиц}}, \quad (147)$$

но основной вклад в массовую плотность ρ вносят частицы

$$\rho_{\text{частиц}} = nm \gg \rho_\gamma \sim \frac{n_\gamma T}{c^2}, \quad (148)$$

если $T \ll mc^2$.

Давление P_γ и энтропия S_γ фотонного газа равны

$$P = \frac{a}{4} T^4 \sim n_\gamma T, \quad S = aT^3 V \sim n_\gamma V, \quad (149)$$

где $a = \frac{4\pi^2}{45(\hbar c)^3}$, n_γ - плотность числа фотонов.

Условие $S = Const$ означает $VT^3 = Const$ то есть

$$\frac{dV}{V} = -\frac{3dT}{T} \quad (150)$$

Тогда

$$dP \sim n_\gamma dT, \quad d\rho = d\left(\frac{Nm}{V}\right) = -\left(\frac{nmdV}{V}\right) = \left(\frac{3nmdT}{T}\right), \quad (151)$$

и следовательно

$$c_S^2 \sim \frac{n_\gamma}{n} \left(\frac{T}{m}\right) \gg c_{S_{\text{частиц}}}^2 \quad (152)$$

Таким образом фотоны, находящиеся в равновесии при высокой температуре с газом заряженных частиц, существенно повышают скорость распространения возмущений плотности. Отметим, что для этого необходимо, чтобы длина свободного пробега фотонов была много меньше характерного размера возмущения плотности.

При более низких температурах следует учесть также вклад частиц в давление и энтропию, а также тот факт, что массовая плотность в рассматриваемых условиях определяется только частицами

$$\varrho = nm = \frac{Nm}{V}, \quad P = \frac{NT}{V} + \frac{1}{4}aT^4, \quad (153)$$

$$S = VaT^3 + N \ln V + \frac{3}{2}N \ln T + S_0. \quad (154)$$

Здесь N – полное число частиц в объёме V , а m – средняя масса частицы. (Для водородной плазмы m – половина массы протона).

Скорость звука $c_s^2 = (\partial P / \partial \rho)_S$ представим в виде

$$c_s^2 = \frac{\partial(P, S)}{\partial(\varrho, S)} = \frac{\partial(P, S)}{\partial(V, T)} \Big/ \frac{\partial(\varrho, S)}{\partial(V, T)}.$$

Вычисление с использованием (153), (154) приводит к результату

$$\frac{\partial(P, S)}{\partial(V, T)} = -\frac{3}{2}n(n + 2aT^3) - (n + aT^3)^2, \quad \frac{\partial(\varrho, S)}{\partial(V, T)} = -\frac{3mn}{2T}(n + 2aT^3),$$

$$c_s^2 = \frac{5T}{3m} \left[1 + \frac{2(aT^3)^2}{5n(n + 2aT^3)} \right].$$

Для $n \gg aT^3$ получается известный результат для одноатомного газа $c_s^2 = 5T/3m$. В случае $n \ll aT^3$, что эквивалентно $n \ll n_\gamma$, получается $c_s^2 \sim (5T/3m)(n_\gamma/n)$, т. е. много больше характерной тепловой скорости частиц.

Для численных оценок ответ удобно представить в таком виде, чтобы можно было подставлять значения температуры в градусах Кельвина:

$$c_s^2 = \frac{5k_B T}{3m} \left[1 + \frac{2(\tilde{a}T^3)^2}{5n(n + 2\tilde{a}T^3)} \right].$$

$$\tilde{a} = ak_B^3 = 4,1 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3} \text{ K}^{-3}.$$

В глубине Солнца концентрация фотонов оказывается сравнима с концентрацией частиц. В слоях Солнца, близких к его поверхности, происходит конвективный перенос тепла, приводящий, помимо прочего, к возникновению шума. От каждой точки поверхности во все стороны распространяется звук. (Размер „точки“ – ячейки конвективного движения ~ 1000 км.) Ещё более мощные колебания возникают при появлении и исчезновении солнечных пятен. Скорость звука растет с глубиной (вместе с температурой и с концентрацией фотонов). Поэтому звуковые волны, распространяющиеся вглубь под углом к вертикали, испытывают преломление, а затем и полное отражение и поворачивают обратно, достигнув той или иной глубины,¹⁶ и возвращаются на по-

¹⁶ Гамильтониан волнового пакета звуковых колебаний $H = c_s(r)p$, где \mathbf{r} определяет положение волнового пакета, а импульс $p = |\mathbf{p}|$ пропорционален волновому вектору „несущей“ звуковой волны. Энергия и момент импульса – интегралы движения. Это приводит к соотношению, определяющему расстояние от центра Солнца $r_m = R(c(r_m)/c(R)) \sin \alpha$, которого достигнет звуковой волновой пакет, в зависимости от угла падения α . (Здесь R – радиус Солнца).

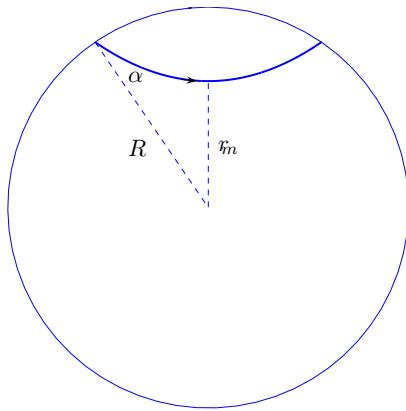


Рис. 20. Схематическое изображение звукового „луча“, стартовавшего с поверхности Солнца под углом α

верхность, удалившись на то или иное расстояние от источника звука. Глубина, которой достигает звуковой „луч“, оказывается связана с расстоянием от источника звука, на котором луч вернётся на поверхность, и с временем, спустя которое это произойдёт. Каждая из точек поверхности Солнца оказывается, таким образом, как источником звука , так и приёмником звука, вернувшегося из глубины. Изучая корреляцию движений вещества в разных точках поверхности Солнца, можно получать сведения о его внутреннем строении (подобно тому, как информация о распространении волн, возникающих при землетрясениях, позволяет исследовать внутреннее строение Земли).

Задача 80. Абсолютно чёрное тело вращается вокруг Солнца по орбите Земли. До какой температуры нагреет его излучение Солнца? Влияния потоков частиц (*солнечного ветра*) не учитывать.

Решение: Солнце излучает в секунду энергию $I = 4\pi r^2 \sigma T_0^4$, где r — радиус Солнца, $T_0 \approx 6000\text{K}$ — температура его поверхности, σ — постоянная Стефана – Больцмана. Для определённости считаем тело шаром радиуса a . В секунду на тело попадает (и поглощается им) энергия $(\pi a^2 / 4\pi R^2)I$, где R — расстояние до Солнца. Тело излучает за то же время энергию $4\pi a^2 \sigma T^4$, где T — температура тела. В установившем-

ся режиме эти энергии должны быть равны, откуда $T = (r/2R)^{1/2}T_0$. Подставив $r_0 = 0,7$ млн км, $R = 150$ млн км, получаем $T \approx 290\text{K}$.

Ответ не изменится, если тело не является абсолютно чёрным. Однако форма тела для ответа существенна. Существенна и зависимость коэффициента отражения от частоты.

Если одна сторона тела чёрная, а другая — отражающая, то его температуру, очевидно, можно регулировать, так или иначе его поворачивая.

Задача 81. Определить условие устойчивого равновесия чёрной дыры с испускаемой ей чернотельным излучением, заключенными в ящик объема V с зеркальными стенками. [41, 40, 36, 43]

Решение:

То, что чёрная дыра способна испускать излучение за счет квантовых эффектов, было открыто С.Хокингом в 1974 г.

Для решения задачи нам понадобится выражение для энтропии чёрной дыры. Найдем сначала из размерных соображений температуру испускаемого чёрной дырой излучения, приравнивая характерную длину волны λ чернотельного излучения с температурой T , $\lambda \sim \hbar c/T$, “размеру” чёрной дыры $r_g \sim GM/c^2$. Откуда получаем оценку

$$T \sim \frac{\hbar c^3}{GM}. \quad (155)$$

Теперь, зная энергию чёрной дыры $E = Mc^2$, и используя термодинамику, получим

$$dS = \frac{dE}{T} \sim \frac{GMd(Mc^2)}{\hbar c^3} \rightarrow S \sim \frac{GM^2}{\hbar c} \quad (156)$$

Точное выражение для энтропии чёрной дыры и температуры испускаемого ей излучения, полученные С.Хокингом, имеют вид

$$S = 4\pi \frac{GM^2}{\hbar c}, \quad T = \frac{1}{8\pi} \frac{\hbar c^3}{GM} \quad (157)$$

Далее для упрощения выражений полагаем $c = 1$, и энтропию чёрной дыры записываем как $S = aM^2$, где $a = 4\pi G/\hbar$. Энергию испускаемого чёрной дырой излучения записываем в виде $E_{rad} = \sigma T^4 V$, энтропию — $S_{rad} = 4\sigma T^3 V/3$. Полная энергия U по условию постоянна: $U = E_{rad} + M = Const$. Тогда выразим температуру через полную

энергию и энергию черной дыры

$$U - M = E_{rad} = \sigma T^4 V \rightarrow T = \left(\frac{U - M}{\sigma V} \right)^{1/4} \quad (158)$$

и получим выражения для энтропии излучения

$$S_{rad} = \frac{4}{3} (\sigma V)^{1/4} (U - M)^{3/4} \equiv b(U - M)^{3/4}, \quad (159)$$

где $b = 4(\sigma V)^{1/4}/3$. Полная энтропия системы S имеет вид

$$S = aM^2 + b(U - M)^{3/4}. \quad (160)$$

В равновесии энтропия должна быть максимальна, откуда

$$\frac{dS}{dM} = 2aM - \frac{3b}{4(U - M)^{1/4}} = 0 \rightarrow \alpha x = \frac{1}{(1 - x)^{1/4}}, \quad (161)$$

где ввели обозначение $x = M/U$ и $\alpha = 8aU^{5/4}/3b$.

Рассмотрим графическое решение этого уравнения, рис. 21, где введены обозначения: $x = M/U$, $F_1(x) = \alpha x$, $F_2 = 1/(1 - x)^{1/4}$.

Видно, что при больших значениях объема решений нет и это соответствует полному испарению черной дыры. При уменьшении объема получается сначала одно решение, а затем два, из которых одно (x_2) является локальным максимумом. Это решение становится устойчивым при некотором критическом значении объема, когда энтропия в максимуме $S(x_2)$ сравнивается с $S(x = 0)$.

Найдем это значение x_2 .

$$S(x = 0) = b(U)^{3/4} = S(x_2) = aU^2 x_2^2 + bU^{3/4}(1 - x_2)^{3/4}. \quad (162)$$

Откуда

$$1 - (1 - x)^{3/4} = \frac{aU^{5/4}}{b} x^2 = \frac{3x}{8(1 - x)^{1/4}} \quad (163)$$

где использовано, что

$$\alpha x = \frac{1}{(1 - x)^{1/4}}. \quad (164)$$

Зависимость полной энтропии системы от энергии черной дыры показана на рис. 22. Наличие двух локальных максимумов у энтропии

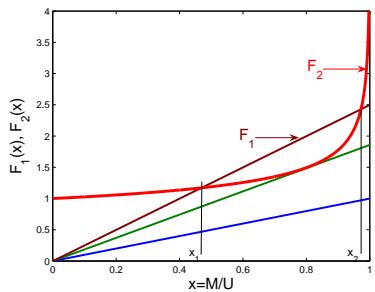


Рис. 21. Графическое решение уравнения $2aM = (\sigma V)^{1/4}/(U - M)^{1/4}$

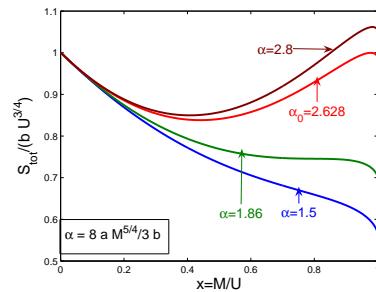


Рис. 22. Полная энтропия системы как функция массы черной дыры при различных значениях объема системы

системы приводит к возможности существования метастабильных состояний.

Перепишем предыдущее уравнение в виде

$$\frac{3x}{8} = (1-x)^{1/4} - 1 + x \rightarrow x = 1 - \left(1 - \frac{5}{8}x\right)^4 \quad (165)$$

Легко сообразить, что решение этого уравнения x_2 не сильно отличается от единицы, так что в первом приближении $x_2 \approx 1 - (3/8)^4 = 1 - 81/4096 \approx 0,98$.

Таким образом, в устойчивом равновесии черной дыры с испускаемым ей излучением почти вся энергия заключена в черной дыре, а на равновесное тепловое излучение приходится около 2 % от всей энергии.

Задача 82. Найти вклад в теплоемкость колебаний атомов двумерной решетки (атомы абсорбированы на поверхности).

Решение:

Раскладывая потенциальную энергию до второго порядка по смещениям атомов из положения равновесия вдоль поверхности (если энергия адсорбции велика, можно пренебречь вкладом смещений, нормальных к поверхности), имеем гамильтониан

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{2N} m \dot{x}_j^2 + \frac{1}{2} \sum_{j,k} V_{j,k} x_j x_k, \quad (166)$$

где $V_{j,k}$ – симметричная матрица. Как хорошо известно из механики, переход к нормальным координатам с помощью выражения

$$x_j = \sum_{\alpha=1}^{2N} a_{\alpha,j} Q_{\alpha}, \quad (167)$$

где коэффициенты $a_{\alpha,j}$ удовлетворяют условию ортонормированности

$$\sum_{j=1}^{2N} a_{\alpha,j} a_{\beta,j} = \delta_{\alpha,\beta}, \quad (168)$$

позволяет диагонализовать гамильтониан

$$H = \frac{m}{2} \sum_{\alpha=1}^{2N} \left(\dot{Q}_{\alpha}^2 + \omega_{\alpha}^2 Q_{\alpha}^2 \right) \rightarrow \sum_{\alpha=1}^{2N} \hbar \omega_{\alpha} \left(\bar{n}_{\alpha} + \frac{1}{2} \right) \quad (169)$$

В равновесии при температуре T мы уже находили для гармонического осциллятора

$$\bar{n}_{\alpha} = \frac{1}{\exp[\beta \hbar \omega_{\alpha}] - 1}, \quad \bar{E}_{\alpha} = \hbar \omega_{\alpha} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp[\beta \hbar \omega_{\alpha}] - 1} \right) \quad (170)$$

Удобно перейти от суммирования по дискретному набору частот (или волновых векторов) к интегрированию, учитывая что плотность числа колебаний для двумерной системы ($d = 2$) равна

$$V \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \propto \omega d\omega, \quad (171)$$

а коэффициент пропорциональности A_2 находим из условия

$$A_2 \int_0^{\omega_m} \omega d\omega = 2N, \quad (172)$$

где ω_m – максимальная частота колебаний. Откуда

$$A_2 = \frac{4N}{\omega_m^2}. \quad (173)$$

Таким образом, переход от суммирования по дискретному набору частот к интегрированию осуществляется как

$$\sum_{\alpha}(\dots) = \frac{4N}{\omega_m^2} \int_0^{\omega_m} \omega d\omega (\dots). \quad (174)$$

Для одномерной ($d = 1$) системы соответствующее выражение принимают вид

$$A_{d=1} \int_0^{\omega_m} d\omega = N, \quad A_{d=1} = \frac{N}{\omega_m}, \quad (175)$$

Вычислим вклад колебаний адсорбированных атомов в теплоемкость. Энергия колебаний равна

$$E = \frac{4N}{\omega_m^2} \int_0^{\omega_m} \frac{\omega \hbar \omega d\omega}{\exp[\hbar\omega/T] - 1} = \frac{4NT^3}{\Theta_D^2} \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^2 dx}{\exp x - 1}, \quad (176)$$

где температура Дебая $\Theta_D \equiv \hbar\omega_m$. При высоких температурах $T \gg \Theta_D$ значения $x \ll 1$, и тогда разлагая экспоненту под интегралом, имеем

$$E = \frac{4NT^3}{\Theta_D^2} \int_0^{\Theta_D/T} x dx = 2NT, \quad (177)$$

а теплоемкость $C = 2N$.

При низких температурах $T \ll \Theta_D$ верхний предел интегрирования можно устремить к бесконечности, тогда

$$E = \frac{4NT^3}{\Theta_D^2} \int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{\exp x - 1} = \frac{4b_2(0)NT^3}{\Theta_D^2}, \quad (178)$$

а теплоемкость

$$C_V = \frac{12b_2(0)NT^2}{\Theta_D^2} \approx \frac{28.85NT^2}{\Theta_D^2}. \quad (179)$$

Задача 83. Найти среднеквадратичное смещение из положения равновесия какого-либо атома.

Решение:

Естественно, что в равновесии среднеквадратичные смещения для всех

компонент и для любых атомов одинаковы, т.е. для любой из $3N$ степеней свободы

$$\langle x_i^2 \rangle = \frac{1}{3N} \sum_{j=1}^{3N} \langle x_j^2 \rangle = \frac{1}{3N} \sum_{\alpha=1}^{3N} \langle Q_{\alpha}^2 \rangle, \quad (180)$$

где в последнем равенстве мы перешли к нормальным координатам, используя соотношение ортонормированности. Используя теорему вириала для гармонического осциллятора, получаем

$$\langle U \rangle = \left\langle \frac{m\omega_{\alpha}^2 Q_{\alpha}^2}{2} \right\rangle = \frac{E}{2} = \frac{1}{2} \hbar \omega_{\alpha} \left(\bar{n}_{\alpha} + \frac{1}{2} \right). \quad (181)$$

Отсюда находим

$$\langle Q_{\alpha}^2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega_{\alpha}} \left(\bar{n}_{\alpha} + \frac{1}{2} \right), \quad (182)$$

и следовательно

$$\langle x_i^2 \rangle = \frac{1}{3N} \sum_{\alpha=1}^{3N} \frac{\hbar}{m\omega_{\alpha}} \left(\bar{n}_{\alpha} + \frac{1}{2} \right) = \frac{3\hbar}{m\omega_m^3} \int_0^{\omega_m} \omega d\omega \left(\frac{1}{\exp[\hbar\omega/T] - 1} + \frac{1}{2} \right) \quad (183)$$

Следует отметить, что в одномерном случае (линейная цепочка) среднеквадратичное смещение расходится даже при учете только нулевых колебаний, что является иллюстрацией теоремы Ландау о невозможности существования одномерных упорядоченных структур. Действительно, используя выражение для плотности состояний в одномерном случае, мы имеем

$$\langle x_i^2 \rangle = \frac{1}{3N} \sum_{\alpha=1}^N \frac{\hbar}{m\omega_{\alpha}} \left(\bar{n}_{\alpha} + \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar}{m\omega_m} \int_0^{\omega_m} \frac{d\omega}{\omega} \left(\frac{1}{\exp[\hbar\omega/T] - 1} + \frac{1}{2} \right) \quad (184)$$

и интеграл даже при учете только нулевых колебаний логарифмически расходится на нижнем пределе, т.е. среднеквадратичное смещение логарифмически растет с размером образца.

Задача 84. Вычислить вероятность испускания без отдачи гаммаизлучения ядром атома, находящегося в кристаллической решетке (эффект Мессбауэра). [49]

Решение:

Для достаточно низких температур $T \ll \Theta_D$ существенный вклад в

среднеквадратичное смещение дают только нулевые колебания

$$\langle x_i^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{3}{2\Theta_D} \quad (185)$$

Эта формула полезна при вычислении вероятности испускания гамма-излучения ядром атома, находящегося в кристаллической решетке, без отдачи – так называемого эффекта Мессбауэра. Для свободного ядра, в качестве примера можно взять ^{57}Fe , энергия отдачи R при излучении гамма-кванта ($E_\gamma = 14,4 \cdot 10^3 \text{ эВ}$)

$$R = \frac{P_{\text{яд}}^2}{2M} = \frac{E_\gamma^2}{2Mc^2} = \frac{(14,4 \cdot 10^3 \text{ эВ})^2}{2 \cdot 57 \cdot 10^6 \text{ эВ}} \approx 2 \cdot 10^{-3} \text{ эВ} \quad (186)$$

значительно превосходит ширину линии $\Gamma \approx 10^{-5} \text{ эВ}$, и следовательно невозможно резонансное поглощение этого гамма-кванта другим ядром ^{57}Fe . Однако, если ядро находится в кристаллической решетке, то существует заметная вероятность, что после излучения гамма-кванта кристалл останется в том же колебательном состоянии и примет отдачу как целое. Естественно, что в этом случае возможно резонансное поглощение гамма-кванта другим ядром, находящимся в аналогичной кристаллической решетке. Записывая начальное состояние ядра в виде разложения по плоским волнам

$$|i\rangle = \sum_{\mathbf{k}'} |\mathbf{k}'\rangle \langle \mathbf{k}'|i\rangle, \quad (187)$$

найдем, что после излучения гамма-кванта с волновым вектором \mathbf{k} , ядро окажется в состоянии

$$|f\rangle = \sum_{\mathbf{k}'} |\mathbf{k}' - \mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}'|i\rangle = \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} |\mathbf{k}'\rangle \langle \mathbf{k}'|i\rangle = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} |i\rangle. \quad (188)$$

Тогда вероятность P_0 , что ядро останется в том же колебательном состоянии есть

$$P_0 = |\langle i|f\rangle|^2 \approx \exp(-k^2 \langle x \rangle^2) = \exp\left(-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{3}{2\Theta_D}\right) = \exp\left(-\frac{3R}{2\Theta_D}\right), \quad (189)$$

где при вычислении мы предположили, что при достаточно низких температурах ядро находится в основном состоянии.

11. Неидеальный классический газ

Задача 85. Найти второй вириальный коэффициент для смеси из N_1 и N_2 нейтральных атомов. [51]

Решение:

Энергию взаимодействия атомов представим в виде суммы парных сферически симметричных потенциалов, что является достаточно хорошим приближением для разреженного инертного газа.

$$U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i < j} u_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j), \quad (190)$$

где индексы α, β указывают тип частиц.

Удобно ввести так называемую функцию Майера $f_{ij}^{\alpha\beta}$, определяемую соотношением

$$f_{ij}^{\alpha\beta} \equiv \exp(-u_{ij}^{\alpha\beta}/T) - 1, \quad (191)$$

которая отлична от нуля только в области пространства, где потенциал парного взаимодействия существенен, т.е. когда атомы находятся близко друг от друга. Тогда для низкой плотности можно разложить полную энергию взаимодействия U по степеням f .

$$\exp\left(-\frac{U}{T}\right) = \prod_{i < j}(1 + f_{ij}^{\alpha\beta}) \approx 1 + \sum_{i < j} f_{ij}^{\alpha\beta} = 1 + \frac{N_1^2}{2} f_{ij}^{11} + \frac{N_2^2}{2} f_{ij}^{22} + N_1 N_2 f_{ij}^{12}, \quad (192)$$

где мы учли, что число пар равно $N_1^2/2, N_2^2/2$ для одинаковых частиц и $N_1 N_2$ —для разных. Введем вириальные коэффициенты $B_{\alpha\beta}(T)$, равные

$$B_{\alpha\beta}(T) = -\frac{1}{2} \int f_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}_{ij}) d^3 r_{ij} = \frac{1}{2} \int \left(1 - e^{-u_{ij}^{\alpha\beta}/T}\right) d^3 r_{ij}. \quad (193)$$

Тогда

$$\begin{aligned} & \int e^{-U/T} \prod_{\alpha=1,2} d^3 r_1^\alpha \dots d^3 r_{N_\alpha}^\alpha = \\ & = V^N \left[1 - \frac{1}{V} (N_1^2 B_{11} + N_2^2 B_{22} + 2N_1 N_2 B_{12}) \right]. \end{aligned} \quad (194)$$

При получении последнего равенства мы учли, что взаимодействие двух атомов зависит только от относительного расстояния и проинтегрировали по положению их центра масс. Свободная энергия F сейчас имеет вид

$$F \approx F_{\text{ид}} + \frac{TN^2}{V} B(T), \quad (195)$$

где $N = N_1 + N_2$ и второй вириальный коэффициент $B(T)$ равен

$$B(T) = \frac{N_1}{N} B_{11} + \frac{N_2}{N} B_{22} + 2 \frac{N_1 N_2}{N^2} B_{12} \quad (196)$$

Задача 86. Выразить величину $(\frac{\partial T}{\partial P})_H$, характеризующую изменение температуры при эффекте Джоуля – Томсона, через теплоёмкость и уравнение состояния для газа с известной зависимостью второго вириального коэффициента от температуры $B(T) = a - b/T$, где $a, b = -Const.$

Решение:

Если пропустить объем газа V_2 находившийся под давлением P_2 через такую перегородку, с другой стороны которой поддерживается давление P_1 , $P_1 < P_2$, и пропущенная масса газа займет объем V_1 и, кроме того, исключить теплообмен с окружением, то энергия газа станет

$$E_1 = E_2 + P_2 V_2 - P_1 V_1, \quad (197)$$

то есть в данном процессе остается постоянной энталпия газа. Найдем насколько изменится температура газа в этом процессе. Из равенств

$$dH = TdS + VdP = 0, \quad dS = \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_P dT + \left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_T dP = \frac{C_P}{T} dT - \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T dP \quad (198)$$

следует

$$\left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_H = \frac{1}{C_P} \left[T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P - V \right] \quad (199)$$

Используя выражение для свободной энергии, получаем уравнение состояния вида

$$P = \frac{NT}{V} \left(1 + \frac{BN}{V} \right) \quad (200)$$

С точностью до членов порядка BN/V отсюда получаем

$$V = \frac{NT}{P} + BN \quad (201)$$

и следовательно

$$\left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_H = \frac{N}{C_P} \left[T \frac{dB}{dT} - B \right] \quad (202)$$

Для многих газов характерная зависимость второго вириального коэффициента B от температуры имеет вид

$$B(T) = a - \frac{b}{T}. \quad (203)$$

Тогда мы получим

$$\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_H = \frac{N}{C_P} \left[\frac{2b}{T} - a \right] = \frac{Na}{C_P} \left[\frac{T_{inv}}{T} - 1 \right], \quad (204)$$

где мы ввели температуру инверсии $T_{inv} = 2b/a$. При $T < T_{inv}$ газ в результате данного процесса будет охлаждаться. Таким способом можно получать сжиженные газы. Для получения жидкого гелия, у которого температура инверсии низка, необходимо применять предварительное охлаждение для достижения температуры, меньшей температуры инверсии.

Задача 87. Для двухатомного слабо неидеального газа известен второй вириальный коэффициент $B(T)$. Найти среднюю энергию в расчете на одну молекулу газа.

Как изменяется температура такого газа при расширении его в пустоту?

Решение:
 $E = E_{ид} - \frac{N^2}{V} B'(T)$. При расширении в пустоту $E = Const$. Чаще всего неидеальный газ в таком процессе (процесс Гей – Люссака) охлаждается. Однако для охлаждения газа использовать такой процесс неудобно.

Задача 88. Выразить величину $\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_H$, характеризующую изменение температуры при эффекте Джоуля – Томсона, через теплоёмкость и уравнение состояния для газа ван-дер-Ваальса.

Решение:
[8, § 13] Для газа ван-дер-Ваальса энталпия

$$H = N \left(c_V T + \frac{T}{1-nb} - 2an \right), \quad (205)$$

где $n = N/V$ — плотность, c_V — теплоёмкость (в расчёте на частицу), которую считаем постоянной. На рис. 23 показаны зависимости $P(T)$ для разных начальных значений температуры и давления и кривая инверсии в процессе Джоуля – Томсона, кривая, на которой

$$\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_H = 0.$$

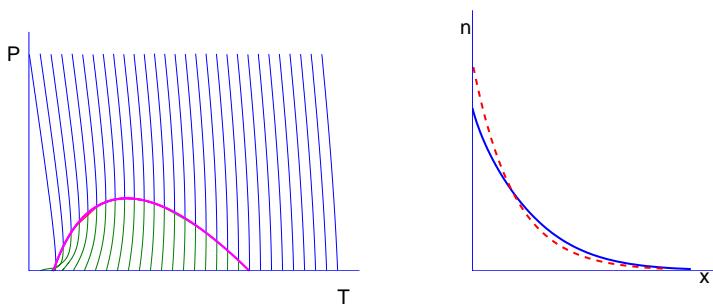


Рис. 23. Зависимость давления от температуры при эффекте Джоуля — Томсона. Под жирной кривой — область параметров, в которой происходит охлаждение

Рис. 24. Зависимость плотности газа ван-дер-Ваальса в поле тяжести от высоты. Пунктирная кривая — аналогичная зависимость для идеального газа

Зависимость $P(T)$ для изображения графиков определена параметрически с использованием (205) и уравнения ван-дер-Ваальса

$$P = \frac{nT}{1 - nb} - an^2.$$

Задача 89. Выразить температуру, давление и молярный объём в критической точке через постоянные, входящие в уравнение ван-дер-Ваальса.

Решение:

$$T_k = 8a/27b; P_k = a/27b^2; V_k = 3b.$$

См., например, [8, § 12], [1, § 83-84].

Задача 90. Газ ван-дер-Ваальса находится в однородном поле тяжести. Определить зависимость плотности газа от высоты, считая температуру постоянной.

Решение:

Можно воспользоваться тем же способом, что в задаче 66. Химический потенциал газа ван-дер-Ваальса выражаем как $(\frac{\partial F}{\partial N})_{V,T}$, где свободная энергия

$$F = F_{\text{ид}} - NT \ln \left(1 - \frac{Nb}{V} \right) - \frac{N^2 a}{V}.$$

$$\mu(x) = \mu_{\text{ид}} - T \ln(1 - nb) - \frac{nbT}{1 - nb} - 2an,$$

$$\mu_{\text{ид}} = T \ln n + f(T).$$

Зависимость $n(x)$ определяется равенством $\mu(x) = \mu - mgx$.

Разумеется, для построения графика (рис. 24) удобнее вычислять $x(n)$. Нормировка графиков выбрана такой, чтобы на них было одинаково полное число частиц.

Задача 91. Найти характерный размер полимерной молекулы с учетом взаимодействия между составляющими ее звеньями цепи. [34, 35]

Решение:

В качестве модели конфигурации идеальной полимерной цепи мы примем случайные блуждания из N шагов на простой кубической решетке с шагом a . Ранее мы рассмотрели одномерную модель и нашли энтропию цепи

$$S = \ln \frac{N!}{N_+! N_-!}, \quad (206)$$

где N_+ – число звеньев, ориентированных в положительном направлении оси x , N_- – число звеньев, ориентированных в отрицательном направлении оси x . Эти величины определяют величину смещения вдоль оси x как $N_+ - N_- = x/a$. Считая $x \ll Na$, мы можем разложить энтропию до второго порядка по x/a и получить

$$S(x) = S(0) - \frac{x^2}{2Na^2} \quad (207)$$

Для трехмерной цепи случайные независимые блуждания по каждому из трех измерений имеют $N/3$ шагов – $N_x = N_y = N_z = N/3$ – и выражение для энтропии получается сложением вкладов от каждого измерения

$$S(r) = S(0) - \frac{x^2 + y^2 + z^2}{2(N/3)a^2} = S(0) - \frac{3r^2}{2Na^2} \quad (208)$$

Тогда вероятность $P(r)$, что расстояние между концами цепи есть r , пропорциональна

$$P(r) \propto \exp(S(r)) \propto \exp\left[-\frac{3r^2}{2Na^2}\right], \quad (209)$$

а среднеквадратичное расстояние между концами цепи есть

$$\bar{r}^2 = \frac{\int_0^\infty r^2 e^{-\alpha r^2} 4\pi r^2 dr}{\int_0^\infty e^{-\alpha r^2} 4\pi r^2 dr} = -\frac{d}{d\alpha} \ln \int_0^\infty e^{-\alpha r^2} 4\pi r^2 dr = \frac{3}{2\alpha} = Na^2, \quad (210)$$

где мы использовали обозначение $\alpha = 3/2Na^2$.

Для идеальной цепи

$$F_0 = E_0 - TS = E_0 + \frac{3r^2 T}{2Na^2}. \quad (211)$$

Для учета взаимодействия между звеньями цепи можно использовать низкую плотность звеньев, которую можно оценить как

$$n_0 = \frac{N}{V} \approx \frac{N}{\bar{r}^3} = N^{-1/2} a^{-3}. \quad (212)$$

Следовательно, мы можем использовать разложение свободной энергии по степеням плотности. Ограничивааясь первым приближением, получим выражение для свободной энергии с учетом взаимодействия между звеньями цепи

$$F \approx F_0 + NT \frac{N}{\bar{r}^3} B(T) \quad (213)$$

Для гибкой цепи второй вириальный коэффициент $B(T) \approx a^3$. Оценим теперь среднеквадратичный размер цепи из условия минимума свободной энергии

$$\frac{\partial F}{\partial \bar{r}} = \frac{3T\bar{r}}{Na^2} - \frac{3TN^2B}{\bar{r}^4} = 0, \quad (214)$$

откуда

$$\bar{r} = aN^{3/5} \left(\frac{B}{a^3} \right)^{1/5} \quad (215)$$

Таким образом при достаточно высоких температурах $B(T) > 0$, что приводит к отталкиванию между звеньями, и полимерная цепь увеличивается в своих размерах по сравнению с идеальной. Этот эффект становится довольно заметным для достаточно длинных цепей с числом звеньев $N = 10^4 - 10^5$.

В случае $B(T) < 0$ свободная энергия, в первом приближении, не имеет минимума и поэтому цепь должна неограниченно сжиматься. Однако при сжатии цепи плотность звеньев возрастает и поэтому следует

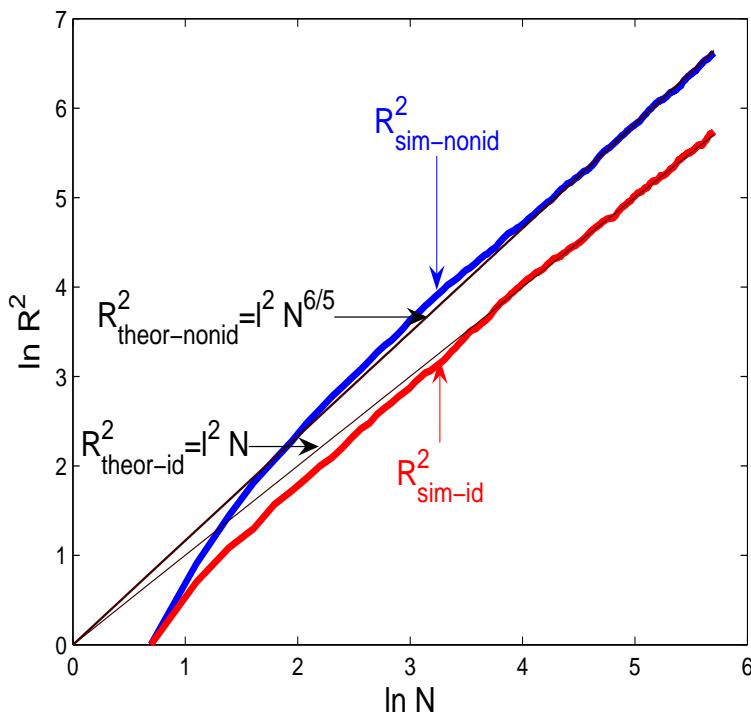


Рис. 25. Среднеквадратичные размеры идеальной и неидеальной полимерных цепей, полученные численным моделированием.

учитывать следующий член в разложении свободной энергии по степеням плотности, пропорциональный $(N/\bar{r}^3)^2$, который ограничивает минимальный размер цепи на уровне $\bar{r} \approx aN^{-1/3}$.

На рис.25 проведено сравнение данных численного моделирования для идеальной и неидеальной полимерных цепей с теоретическими предсказаниями.

12. Фазовые переходы I рода

Задача 92. Найти зависимость теплоты испарения λ_{ev} от температуры вдоль кривой равновесия жидкость – пар.

Решение:

Имеем

$$\frac{d\lambda_{ev}}{dT} = \frac{d}{dT}(T\Delta S) = \frac{\lambda_{ev}}{T} + T \left(\frac{\partial \Delta S}{\partial T} \right)_P + T \left(\frac{\partial \Delta S}{\partial P} \right)_T \frac{dP}{dT}. \quad (216)$$

Используя

$$\left(\frac{\partial \Delta S}{\partial P} \right)_T = \frac{\partial(\Delta S, T)}{\partial(P, T)} = -\frac{\partial(P, V)}{\partial(P, T)} = -\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P, \quad (217)$$

получим

$$\frac{d\lambda_{ev}}{dT} = \frac{\lambda_{ev}}{T} + \Delta C_p - T \left(\frac{\partial \Delta V}{\partial T} \right)_P \frac{\lambda_{ev}}{T \Delta V}. \quad (218)$$

Для перехода жидкость – газ $\Delta V \approx v_g$ и считая пар идеальным газом, получим что первый и третий члены сокращаются. Таким образом из

$$\frac{d\lambda_{ev}}{dT} = \Delta C_p \quad (219)$$

следует, что теплота перехода вдоль кривой равновесия жидкость – пар очень слабо зависит от температуры.

Задача 93. Найти зависимость давления насыщенных паров от температуры для перехода жидкость – пар.

Решение:

Поскольку объем, приходящийся на одну молекулу в газовой фазе, v_g , гораздо больше объема, приходящегося на одну молекулу в жидкости, v_l , и пар в хорошем приближении можно рассматривать как идеальный газ, мы имеем

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\lambda_{ev} P}{RT^2} \quad (220)$$

где λ_{ev} – теплота испарения 1 моля, равная 45 КДж, а R – газовая постоянная, 8,3 Дж/град. Тогда

$$P(T) = P(T_0) \exp \left[\frac{\lambda_{ev}}{R} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (221)$$

Известно, что вода при нормальном давлении кипит (т.е. давление насыщенных паров сравнивается с атмосферным давлением) при $T \approx 370^{\circ}K$. При уменьшении давления в два раза температура кипения снижается на

$$\Delta T \approx \frac{T_0^2 R}{\lambda_{ev}} \ln \frac{P}{P_0} \approx 20^{\circ}K. \quad (222)$$

Задача 94. Найти изменения температуры и давления в тройной точке воды, если в сосуде помимо водяного пара имеется воздух при атмосферном давлении P_a .

Решение:

Исходно тройная точка определялась равенством химических потенциалов всех трех фаз – твердой (s), жидкой (l) и газообразной (g)

$$\mu_s(P_0, T_0) = \mu_l(P_0, T_0) = \mu_g(P_0, T_0) \quad (223)$$

Присутствие воздуха увеличивает давление в твердой и жидкой фазах, что приводит к, как мы увидим ниже, к небольшому сдвигу тройной точки. Теперь условие равновесия трех фаз записывается как

$$\begin{aligned} \mu_s(P_0 + \delta P + P_a, T_0 + \delta T) &= \mu_l(P_0 + \delta P + P_a, T_0 + \delta T) = \\ &= \mu_g(P_0 + \delta P, T_0 + \delta T) \end{aligned} \quad (224)$$

Раскладываем это равенство по малому параметру δT и "малому" параметру $P_a + \delta P$ (основанием для разложения здесь служит малая сжимаемость жидкой и твердой фаз при изменении давления на $P_a = 760$ мм.рт.ст.), получаем

$$\begin{aligned} (v_s - v_l)(\delta P + P_a) &= \frac{\lambda_f}{T_0} \delta T \\ v_g(\delta P) - v_l(\delta P + P_a) &= \frac{\lambda_{ev}}{T_0} \delta T \end{aligned} \quad (225)$$

Откуда

$$\delta P = P_a \frac{\Delta(v_l - v_s) - v_l}{(v_g - v_l) - \Delta(v_l - v_s)}, \quad \delta T \approx \frac{v_g \delta P - v_l P_a}{\lambda_{ev}} \quad (226)$$

где $\Delta = \lambda_{ev}/\lambda_f$. Численно получаются такие результаты: $\delta T \sim 10^{-5}^{\circ}K$, $\delta P \sim 10^{-2}$ мм.рт.ст.

Задача 95. Найти критический радиус зародыша при конденсации пара в жидкость.

Решение:

Образование новой фазы происходит в результате роста зародышей, которые образуются в результате флуктуаций, и связано с образованием поверхности раздела двух фаз. Феноменологически поверхностные эффекты учитываются введением свободной энергии поверхностного напряжения

$$F_{sur} = \sigma S \quad (227)$$

где σ – коэффициент поверхностного напряжения. Для воды $\sigma = 73$ эрг/см² при $T = 300^\circ K$.

Вероятность состояния системы с определенными значениями E и V при постоянных значениях давления P_0 и температуры T_0 , как известно, пропорциональна

$$W \sim \exp\left(-\frac{E - T_0 S + P_0 V}{T_0}\right) \quad (228)$$

Тогда вероятность, что n молекул пара сконденсируются в капельку жидкости объема $v_l = 4\pi r^3/3$, с учетом поверхностной свободной энергии $F = \sigma 4\pi r^2$, пропорциональна

$$W \sim \exp\left(-\frac{\Delta F + P_0 \Delta V + 4\pi r^2 \sigma}{T_0}\right), \quad (229)$$

где изменения свободной энергии и объема складываются из изменений для жидкости (индекс l) и пара (индекс g): $\Delta F = \Delta F_g + \Delta F_l$, $\Delta V = \Delta V_g + v_l$. Давление P в капле жидкости радиуса r из-за поверхностного напряжения больше давления пара P_0 на величину $\Delta P = 2\sigma/r$. Тогда

$$\begin{aligned} \Delta F + P_0 \Delta V &= \Delta F_g + P_0 \Delta V_g + \Delta F_l + P v_l + (P_0 - P) v_l = \\ &= n [\mu_l(P, T_0) - \mu(P_0, T_0)] + (P_0 - P) v_l. \end{aligned} \quad (230)$$

Раскладывая $\mu_l(P, T_0) \approx \mu_l(P_0, T_0) + (P - P_0)v_l$, получим

$$\Delta F + P_0 \Delta V + 4\pi r^2 \sigma = \Delta \Phi' = n [\mu_l(P_0, T_0) - \mu(P_0, T_0)] + 4\pi r^2 \sigma. \quad (231)$$

Считая, что в жидкости на одну молекулу приходится фиксированный объем v_0 и n молекул новой фазы имеет форму с минимальной поверхностью, т.е. шара радиуса r , последнее равенство можно переписать как

$$\Delta \Phi' = \frac{4\pi r^3}{3v_0} \Delta \mu + 4\pi r^2 \sigma \quad (232)$$

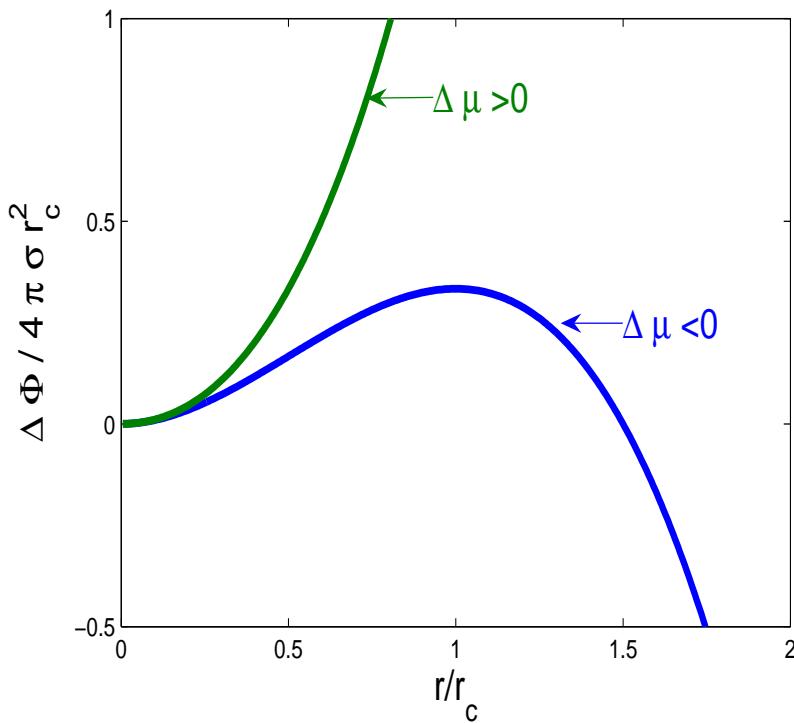


Рис. 26. Изменение термодинамического потенциала при образовании капли новой фазы радиуса r .

зависимость которой от радиуса капли новой фазы показана на рис.26. Из рисунка видно, что в любом случае образование капли новой фазы, которое происходит за счет флуктуаций, при достаточно малом радиусе капли $r < r_c$ связано с возрастанием потенциала Гиббса (в конечном счете – с уменьшением энтропии). Лишь при достаточно редких флуктуациях, когда радиус капли новой фазы достигнет значения r_c , дальнейший рост радиуса капли будет приводить к уменьшению потенциала Гиббса. Критический размер капли новой фазы находится из условия

$$\frac{d}{dr} \left[\frac{4\pi r^3}{3v_0} \Delta\mu + 4\pi r^2 \sigma \right] = 0 \quad (233)$$

откуда

$$r_c = \frac{2\sigma v_0}{|\Delta\mu|} \quad (234)$$

Изменение при этом составляет

$$\Phi'(r = r_c) - \Phi'(r = 0) = \frac{16\pi\sigma^3 v_0^2}{3(\Delta\mu)^2} \quad (235)$$

а вероятность образования зародыша новой фазы такого размера

$$W(r = r_c) \propto \exp \left[-\frac{16\pi\sigma^3 v_0^2}{3T(\Delta\mu)^2} \right] \quad (236)$$

Задача 96. Найти насколько изменится вероятность образования зародыша новой фазы, если зародыш имеет заряд. [46]

Решение:

Вероятность образования зародыша новой фазы на заряженной частице больше из-за уменьшения электростатической энергии. Действительно, если мы представим заряженный ион в виде шарика радиуса a , то изменение электростатической энергии, связанное с конденсацией на нем жидкости в виде капли радиуса r , диэлектрическая проницаемость ε которой гораздо больше чем пара, составляет

$$\Delta W = \int_a^r \frac{E'D - E^2}{8\pi} 4\pi r'^2 dr' = \left(\frac{1}{\varepsilon} - 1 \right) \int_a^r \frac{e^2 dr'}{2r'^2} < 0, \quad (237)$$

где $E' = e/r'^2$ – поле иона до конденсации; тогда из условия непрерывности D на внешней границе капли после конденсации $D = e/r^2$ т.е. $E = e/(\varepsilon r'^2)$ (ε – диэлектрическая проницаемость воды).

На это принципе основано действие камеры Вильсона, позволяющей визуально наблюдать треки заряженных частиц. Пусть имеется насыщенный пар, а затем давление адиабатически уменьшается на δP за счет быстрого увеличения объёма камеры. Найдем вероятность образования критического зародыша. При адиабатическом процессе $P^{1-\gamma}T^\gamma = Const$ (здесь $\gamma = C_p/C_v$ – показатель адиабаты), следовательно

$$\delta T = \frac{T(\gamma - 1)}{P\gamma} \delta P \quad (238)$$

Тогда

$$\Delta\mu = (v - v)\delta P - (s - s)\delta T \approx \left[v - \frac{\lambda(\gamma - 1)}{P\gamma} \right] |\delta P| < 0 \quad (239)$$

и в результате получается перенасыщенный пар. Вероятность, что конденсация будет происходить на ионах, образованных заряженной частицей вдоль ее траектории для не очень большой степени пресыщения больше с фактором $\exp(-\Delta W/T)$, чем в результате образования нейтрального зародыша.

Задача 97. Насыщенный водяной пар находится в теплоизолированном сосуде. Объем сосуда уменьшают. Станет ли пар пересыщенным?

Решение:

Сравним величину $\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S$ с $\frac{dT}{dV}$ вдоль кривой равновесия фаз.

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = \frac{\partial(T, S)}{\partial(V, S)} = \frac{\partial(P, V)}{\partial(V, S)} = \frac{\partial(P, V)}{\partial(V, T)} \frac{\partial(V, T)}{\partial(V, S)} = - \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V \frac{T}{C_V},$$

$$\frac{dV}{dT} = \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P + \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T \frac{dP}{dT} = \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P + \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T \frac{q}{T\Delta v}.$$

С учетом уравнения состояния $PV = NT$ и $\Delta v \approx V/N$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S / \frac{dT}{dV} = \frac{N}{C_V} \left(\frac{q}{T} - 1\right)$$

Задача 98. Найти зависимость скрытой теплоты фазового перехода от температуры dq/dT . Рассмотреть случаи испарения (например, воды при $T \sim 100 {}^\circ C$) и плавления льда.

Решение:

Представив скрытую теплоту испарения в виде $q = T\Delta s$, получаем

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dT} &= \Delta s + T \frac{d\Delta s}{dT} = \frac{q}{T} + T \left(\frac{\partial \Delta s}{\partial T}\right)_P + T \left(\frac{\partial \Delta s}{\partial P}\right)_T \frac{dP}{dT} = \\ &= \frac{q}{T} + \Delta c_P - \left(\frac{\partial \Delta v}{\partial T}\right)_P \frac{q}{\Delta v}. \end{aligned} \quad (240)$$

Для испарения воды можно принять $\Delta v = v = T/P$, что приводит к

$$\frac{dq}{dT} = \Delta c_P \equiv c_{P\text{пара}} - c_{P\text{жидк.}} \ll \frac{q}{T}.$$

Если интервал температур не очень широк, можно принять с хорошей точностью $q \approx \text{const}$.

Для плавления льда можно пренебречь последним слагаемым в (240) по сравнению с первым.

Задача 99. Давление насыщенного водяного пара при некоторых значениях температуры:

$T(^{\circ} \text{C})$	20	30	100
$P (\text{Па})$	2333	4240	101325

(см. [19].)

Приняв, что скрытая теплота испарения зависит от температуры линейно, получить зависимость $P(T)$ в этом диапазоне температур.

Найти зависимость плотности насыщенного водяного пара от температуры.

Решение:

Ответ можно представить в форме

$$P = P_0 \exp \left(\frac{q}{T_0} - \frac{q}{T} \right) \left(\frac{T_0}{T} \right)^a,$$

где $P_0 = 2333 \text{ Па}$, $T_0 = 293^{\circ} \text{K}$, $q = 6724,8^{\circ} \text{K}$, $a = 4,7695$.

Плотность $n = P\mu/RT$, $\mu = 18 \text{ г}$, $R = 8,314 \text{ Дж / (моль К)}$.¹⁷

Задача 100. Насыщенный водяной пар при $T=100^{\circ}\text{C}$ имел давление 1 атм. На сколько процентов изменилась его плотность в процессе, при котором давление возросло до 1,01 атм. и пар остался насыщенным?

Решение:

$$\frac{dv_{\text{п}}}{v_{\text{п}}} = -\frac{dP}{P} \left(1 - \frac{T}{q} \right).$$

Подставив $q = 6,78 \cdot 10^{-20} \text{Дж/част.}$, $k_{\text{Б}} = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{Дж/K}$, $T = 373 \text{K}$, получаем $k_{\text{Б}}T/q = 0,076 \ll 1$, так что $dv_{\text{п}}/v_{\text{п}} = -0,01$.

Задача 101. В сосуд, объём которого 1 л, налили 1 г воды и закупорили его, после чего сосуд стали нагревать. При какой температуре вся вода испарится?

Решение:

Число молей воды в сосуде $\nu = 1/18$, на моль приходится объём $v = 22,4 \cdot 10^{-3} \cdot 293/273 \text{ м}^3$. Искомая температура определяется условием $Pv = RT$, где зависимость $P(T)$ найдена ранее, $R = 8,314 \text{ Дж/(моль K)}$. $T = 35^{\circ}\text{C}$.

¹⁷ Тут что-то явно не то с округлением, но мы воспроизвели точность, указанную в таблицах [19].

При вычислении числа частиц воды в сосуде мы пренебрегали наличием пара в начальном состоянии. В расчёте зависимости $P(T)$ не учтено давление воздуха, находящегося в сосуде. Несложно убедиться, что это приводит к малым поправкам.

Задача 102. В закрытом сосуде находятся в равновесии пар и небольшое количество жидкости. При нагревании сосуда количество жидкости убывает и при некоторой температуре в сосуде остаётся только пар. При этой температуре теплоёмкость содержимого сосуда испытывает скачок. Найти величину этого скачка. Объём сосуда в процессе нагревания считать постоянным.

Решение:

$$\frac{\Delta C_V}{N} = -\frac{q}{T} \left(\frac{q}{T} - 1 \right).$$

(Учтено, что $v_{\text{п}} \gg v_{\text{в}}$.) При наличии воды теплоёмкость определялась в первую очередь ее испарением, поэтому скачок очень велик $\Delta C \approx 240$.

Задача 103. За какое время испарится капля воды, находящаяся в сухом воздухе, температура которого равна 20°C ? Начальный радиус капли равен $a_0 = 1$ мм. Какой будет в процессе испарения температура капли? Коэффициент диффузии водяного пара в воздухе равен $D = 0,22 \text{ см}^2/\text{с}$, коэффициент теплопроводности воздуха $\lambda = 0,024 \text{ Вт}/(\text{см К})$, давление насыщенного водяного пара и скрытую теплоту испарения воды q в зависимости от температуры можно найти в предыдущих задачах.

Решение:

Будем решать задачу, предполагая, что распределения концентрации пара $n(r)$ и температуры $T(r)$ вокруг капли устанавливаются за время, гораздо меньшее, чем существенно изменяется её радиус a . Основанием для такого подхода является чрезвычайно большая разница плотностей воды $n_{\text{ж}}$ и пара n . Действительно, оценку времени t_0 , за которое устанавливается распределение концентрации водяного пара на расстоянии порядка радиуса капли a , можно получить из уравнения диффузии $\frac{\partial n}{\partial t} = D\Delta n$, учитывая, что концентрация пара существенно падает на расстоянии $\sim a$ от капли: $n/t_0 \sim Dn/a^2$, $t_0 \sim a^2/D$. Оценка же времени t существенного смещения границы капли получается из условия $|n_{\text{ж}} \frac{da}{dt}| \approx |D\nabla n|$, откуда $n_{\text{ж}}a/t \sim Dn/a$, $t \sim \frac{n_{\text{ж}}}{n}t_0 \gg t_0$. Таким образом, можно рассматривать состояние пара при определённом значении радиуса капли с хорошей точностью как стационарное. Это

значит, что диффузионный поток частиц $I = -D \frac{dn}{dr} 4\pi r^2$ не зависит от r . Отсюда $n(r) = \frac{I}{4\pi Dr}$ (с учётом того, что $n \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$). Поток I может быть выражен через концентрацию пара на границе капли $n_a \equiv n(a)$: $I = 4\pi D a n_a$. Это концентрация насыщенного пара при температуре капли, равной $T_a \equiv T(a)$. Эта температура ниже температуры окружающего воздуха $T_0 = T(\infty)$. К капле направлен поток теплоты, необходимый для испарения воды с её поверхности $Q = Iq$.

Величина этого потока определяется градиентом температуры: $Q = \lambda \frac{dT}{dr} 4\pi r^2$ и также не зависит от r . Поэтому $T(r) = -\frac{Q}{4\pi \lambda r} + T_0$. Температура капли $T_a = T_0 - \frac{Dq}{\lambda} n_a$. Уменьшение температуры капли приводит к уменьшению плотности окружающего её насыщенного пара, а это в свою очередь уменьшает диффузионный поток от капли и влияет тем самым на величину $\delta T = T_0 - T_a$. Величину δT находим из уравнения $\delta T = \frac{Dq}{\lambda} n(T - \delta T)$. (Зависимость $n(T)$ найдена в задаче 5.3). Капля оказывается холоднее окружающего воздуха на $\delta T \approx 15$ К.

Объём капли убывает со скоростью $\frac{4\pi}{3} \frac{da^3}{dt} = \frac{I}{n_{ж}}$, где $n_{ж} = 1 \text{ г}/\text{см}^3$ — плотность воды. Подставив $I = 4\pi D a n_a$, получаем $a^2 = a_0^2 - 2D \frac{n_a}{n_{ж}} t$, время испарения капли $t = \frac{a_0^2 n_{ж}}{2D n_a} \approx 56$ мин. (Без учета охлаждения капли мы получили бы $t \approx 22$ мин).

Задача 104. Найти радиус кривизны капли воды, находящейся в равновесии с пересыщенным паром, и исследовать устойчивость такого равновесия.

Решение:

Будем считать далее, что температура капли совпадает с температурой пара T . Обозначим давление насыщенного пара, находящегося в контакте с плоской поверхностью жидкости, $P^{(0)}$. Это давление определяется условием $\mu_0(T, P^{(0)}) = \mu(T, P^{(0)})$, где μ_0 и μ — химические потенциалы пара и жидкости. (Далее аргумент T , который всюду имеет одно и то же значение, опускаем.)

Давление насыщенного пара, находящегося в контакте с поверхностью капли жидкости, обозначим P_0 , а „пересыщение пара“ $\delta P = P_0 - P^{(0)}$. Как известно, давление жидкости в капле радиуса r больше давления пара на величину $\frac{2\alpha}{r}$, где α — коэффициент поверхностного натя-

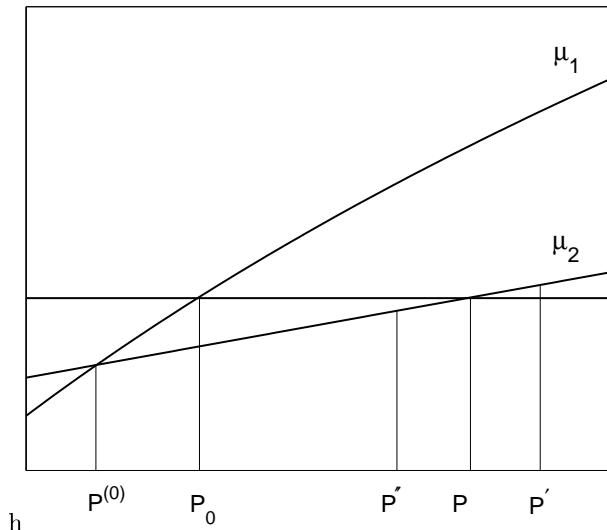


Рис. 27. К исследованию устойчивости равновесного размера капли

жения. Условие равновесия по отношению к обмену молекулами между жидкостью и паром

$$\mu_0(P_0) = \mu \left(P_0 + \frac{2\alpha}{r} \right). \quad (241)$$

Далее можно сделать разложение по малым величинам δP для пара и $\delta P + \frac{2\alpha}{r}$ — для жидкости. Учитывая, что $\frac{\partial \mu}{\partial P} = v = \frac{V}{N}$, $v \ll v_0$, получаем¹⁸

$$\delta P = \frac{2\alpha}{r} \frac{v}{v_0 - v} \approx \frac{2\alpha}{r} \frac{v}{v_0}.$$

На рис.27 показана зависимость химических потенциалов пара (μ_1) и жидкости (μ_2) от давления. Давление P_0 большого объема пара, а с ним и химический потенциал пара $\mu_0(P_0)$ можно считать неизменным. Давление жидкости $P = P_0 + \frac{2\alpha}{r}$. Если радиус капли уменьшится (за счет

¹⁸ Для жидкости следующий член разложения много меньше, так как $\frac{\partial v}{\partial P} \frac{2\alpha}{r} \ll v$, поэтому достаточно сохранить линейный член разложения.

флуктуаций числа молекул в капле), то давление в ней возрастет (P' на рис. 27), химический потенциал станет больше химического потенциала пара, обмен молекулами с паром будет приводить к преимущественному переходу молекул из капли в пар и дальнейшему уменьшению радиуса капли. И наоборот, случайное увеличение числа частиц в капле ведет к уменьшению давления в ней (P'' на рис. 27), уменьшению ее химического потенциала и дальнейшему росту капли. Таким образом равновесие капли радиуса $r = \frac{2\alpha v}{\delta P v_0}$ с пересыщенным паром неустойчиво, (см. также [18, §35,41] [8, §27].)

Задача 105. Найти зависимость температуры плавления льда от давления на лёд при условиях, когда давление образующейся при этом воды оказывается равно атмосферному.

13. Фазовые переходы II рода (критические явления)

Задача 106. Вещество имеет температуру немного ниже температуры фазового перехода второго рода. Имеются две области вещества, в которых параметр порядка $\eta = \pm\eta_0$. Полагая, что на переходном участке между этими областями параметр η зависит лишь от одной координаты x , и используя аналогию с задачами аналитической механики, найти зависимость $\eta(x)$ и величину поверхностного натяжения σ (в рамках модели Цернике - Оринштейна – ???).

Решение:

[16, гл. VII]. Зависимость $\eta(x)$ определяется условием минимума функционала

$$\Omega = \int_{-\infty}^{\infty} \left[g \left(\frac{d\eta}{dx} \right)^2 + \phi(\eta) \right] dx, \text{ где } \phi = at\eta^2 + B\eta^4, \quad t = T - T_k, \quad t < 0. \quad (242)$$

В области вещества, где расположена одна фаза, параметр порядка η имеет постоянное значение, соответствующее минимуму $\phi(\eta)$:

$$\eta_0 = \pm \left(\frac{a|t|}{2B} \right)^{1/2}.$$

Условие минимума Ω подобно принципу наименьшего действия в

классической механике для частицы. При этом x играет роль времени, η — координаты, ϕ — потенциальной энергии (с обратным знаком), g — половины массы. Переход от области $\eta_0 < 0$ к области $\eta_0 > 0$ — движение частицы.

Мы не будем записывать уравнения Эйлера этой вариационной задачи („уравнения движения“), а сразу же запишем „интеграл энергии“:

$$g \left(\frac{d\eta}{dx} \right)^2 - \phi(\eta) = E.$$

В глубине каждой из фаз параметр порядка становится постоянным и равным $\pm\eta_0$. Этому отвечает выбор постоянной интегрирования $E = -\phi(\eta_0)$. Таким образом,

$$g \left(\frac{d\eta}{dx} \right)^2 = \phi(\eta) - \phi(\eta_0). \quad (243)$$

Подставив ϕ , η_0 , получаем (для движения от $\eta < 0$ к $\eta > 0$)

$$\frac{d\eta}{dx} = \left(\frac{B}{g} \right)^{1/2} (\eta_0^2 - \eta^2).$$

Из этого уравнения легко найти

$$\eta = \eta_0 \operatorname{th} \frac{x}{R}, \quad R = \left(\frac{2g}{a|t|} \right)^{1/2}.$$

Коэффициент поверхностного натяжения совпадает с „поверхностной“ добавкой к потенциалу Ω :

$$\sigma = \Delta\Omega = \int_{-\infty}^{\infty} [g(\eta'(x))^2 + \phi(\eta) - \phi(\eta_0)] dx. \quad (244)$$

С учетом (243),(244)

$$\sigma = 2g \int_{-\infty}^{\infty} [\eta'(x)]^2 dx = 2(Bg)^{1/2} \int_{-\eta_0}^{\eta_0} (\eta_0^2 - \eta^2) d\eta = \frac{g^{1/2}(2a|t|)^{3/2}}{3B}.$$

Задача 107.

Найти в приближении среднего поля поведение вблизи критической точки намагниченности, теплоемкости, восприимчивости. [45]

Решение:

В приближении среднего поля предполагается что в члене, описывающем взаимодействие между спинами, можно провести замену $S_j \rightarrow \bar{S}$, т.е. рассматриваем каждый спин как находящийся в среднем поле, создаваемом ближайшими соседями. Тогда вычисление статсуммы

$$Z = \sum_{S_i=\pm 1} \exp \left[\beta \sum_{i,j} J_{i,j} S_i S_j + \beta \sum_i h_i S_i \right], \quad (245)$$

разбивается на произведение сумм по двум возможным направлениям спина в каждом узле решетки

$$Z = \prod_i \sum_{S_i=\pm 1} \exp [\beta(2dJ + h)S_i] = [2 \cosh (2dJ\bar{S} + h)]^N \quad (246)$$

В последнем равенстве мы считаем, что спины расположены на простой кубической d -мерной решетке и находятся в однородном магнитном поле. Теперь можно найти намагниченность, приходящуюся на один спин

$$\bar{S} = \frac{M}{N} = \frac{T}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial h} = \tanh[\beta(2dJ\bar{S} + h)] \xrightarrow{h \rightarrow 0} \tanh(2\beta dJ\bar{S}) \quad (247)$$

В нулевом магнитном поле получается ненулевая намагниченность при условии $2\beta dJ \geq 1$, т.е. критическая температура равна $T_c = 2dJ$.

Немного ниже критической температуры величина \bar{S} мала и можно разложить \tanh , получая уравнение

$$\bar{S} = \frac{T_c}{T} \bar{S} - \frac{1}{3} \left(\frac{T_c \bar{S}}{T} \right)^3. \quad (248)$$

Отсюда получаем зависимость параметра порядка от температуры вблизи критической точки в приближении среднего поля

$$\bar{S} = \sqrt{\frac{3(T_c - T)}{T_c^2}} \approx \sqrt{\frac{3(T_c - T)}{T_c}}, \quad (249)$$

т.е. значение критического показателя для параметра порядка такое же как в теории Ландау $\beta = 1/2$.

Средняя энергия E в приближении среднего поля равна

$$E = -NdJ\bar{S}^2, \quad (250)$$

где N – полное число спинов. Выше критической точки $\bar{S} = 0$, а немного ниже можно использовать полученное приближение

$$E = -NdJ \frac{3(T_c - T)}{2dJ}, \quad (251)$$

откуда получаем скачек теплоемкости в точке фазового перехода

$$\Delta C \equiv C(T_c + 0) - C(T_c - 0) = -\frac{3}{2}N. \quad (252)$$

В линейном по магнитному полю h приближении получается уравнение

$$h = \bar{S} \left(\frac{T - T_c}{T} \right) + \frac{1}{3} \left(\frac{T_c \bar{S}}{T} \right)^3 \quad (253)$$

такое же как в теории Ландау, так что совпадают все критические показатели.

Недостатком теории среднего поля является пренебрежение флюктуациями, а их роль возрастает с понижением пространственной размерности решетки из-за уменьшения числа соседей, влияющих на выстраивание данного спина. Как следствие для линейной цепочки ($d = 1$) теория среднего поля предсказывает ненулевое значение критической температуры, тогда как точное решение показывает отсутствие спонтанного намагничивания.

Задача 108.

Используя теорию Ландау найти намагниченность в магнитном поле вида $h = h_0\delta(\rho)$, где ρ – двумерный вектор в плоскости x, y (в систему внесли очень тонкий бесконечно длинный соленоид вдоль оси z).

Решение:

Варьируя выражение для свободной энергии (намагниченность имеет только z -компоненту),

$$F = \int dV [aM^2 + bM^4 + c(\nabla M)^2 - h_0\delta(\rho)M], \quad (254)$$

получаем

$$\delta F = \int dV [2aM + 4bM^3 - 2c\Delta M - h_0\delta(\rho)] \delta M, \quad (255)$$

здесь мы один раз проинтегрировали по частям член с градиентом и опустили поверхностный член, считая что $\nabla M \rightarrow 0$ на границе образца. Из условия минимальности свободной энергии в линейном приближении получаем уравнение на равновесный параметр порядка выше критической точки

$$-\Delta M + \frac{a}{c}M = \frac{h_0}{2c}\delta(\rho), \quad (256)$$

здесь Δ - двумерный лапласиан. Введем обозначение $a/c = 1/\xi^2$ и будем решать это уравнение, используя преобразование Фурье

$$M(\vec{k}) = \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\rho}} M(\vec{\rho}) d^2\vec{\rho}, \quad (257)$$

получая алгебраическое уравнение

$$\left(k^2 + \frac{1}{\xi^2}\right) M(\vec{k}) = \frac{h_0}{2c}. \quad (258)$$

Выполняя обратное преобразование, имеем

$$M(\vec{\rho}) = \int \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{\rho}}}{k^2 + 1/\xi^2} \frac{d^2\vec{k}}{(2\pi)^2}. \quad (259)$$

Используя интегральное представление

$$\frac{1}{k^2 + 1/\xi^2} = \int_0^\infty d\lambda e^{-\lambda(k^2 + 1/\xi^2)}, \quad (260)$$

мы можем проинтегрировать сначала в декартовых координатах по k_x, k_y , например,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk_x e^{-\lambda k_x^2 + ik_x x} = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} e^{-x^2/4\lambda}, \quad (261)$$

так что получаем

$$M(\vec{\rho}) = \frac{B_0}{8\pi c} \int_0^\infty \frac{d\lambda}{\lambda} e^{-(\rho^2/4\lambda + \lambda/\xi^2)}. \quad (262)$$

Этот интеграл для $\rho \gg \xi$ берется методом Лапласа, именно,

$$\int g(\lambda) e^{-f(\lambda)} d\lambda \approx g(\lambda_0) \sqrt{\frac{2\pi}{f''(\lambda_0)}} e^{-f(\lambda_0)}, \quad (263)$$

где в точке λ_0 функция $f(\lambda)$ имеет минимум. В нашем случае

$$f(\lambda) = \frac{\rho^2}{4\lambda} + \frac{\lambda}{\xi^2}, \quad (264)$$

следовательно

$$f'(\lambda) = -\frac{\rho^2}{4\lambda^2} + \frac{1}{\xi^2} \rightarrow \lambda_0 = \frac{\rho\xi}{2}, \quad f(\lambda_0) = \frac{\rho}{\xi} \gg 1, \quad f''(\lambda_0) = \frac{\rho^2}{2\lambda_0^3}. \quad (265)$$

Итак, мы получаем после подстановки всех полученных выражений

$$M(\vec{\rho}) = \frac{h_0}{4c} \sqrt{\frac{\xi}{2\pi\rho}} e^{-\rho/\xi}, \quad (266)$$

т.е. ξ – действительно является корреляционной длиной (расстоянием, на котором система перестает ощущать влияние магнитного момента в начале координат, выстроенного приложенным внешнем магнитным полем). Вспоминая о введенном для ξ обозначении

$$\xi = \sqrt{\frac{c}{\alpha(T - T_c)}} \sim (T - T_c)^{-1/2} \quad (267)$$

мы находим, что критический индекс для корреляционной длины $\nu = 1/2$.

Задача 109.

Найти скачок теплоёмкости латуни состава $CuZn$ в точке упорядочения сплава. Кристаллическая решетка кубическая объёмноцентрированная. Использовать приближение молекулярного поля, учитывая лишь взаимодействие ближайших соседей.

Решение:

Мы будем рассматривать кристалл, находящийся в термостате, и определять его состояние, находя минимум свободной энергии $F = E - TS$. Чтобы выразить свободную энергию, нам нужно найти энергию взаимодействия атомов друг с другом и энтропию кристалла, связанную с размещением атомов.

Будем обозначать „медную“ подрешётку A , а „цинковую“ – B . Число атомов меди в „медной“ подрешётке N_{aA} , число атомов цинка в „медной“ подрешётке N_{bA} , число атомов меди в „цинковой“ подрешётке N_{aB} , число атомов цинка в „цинковой“ подрешётке N_{bB} .

$$N_{aA} + N_{aB} = N; \quad N_{bA} + N_{bB} = N;$$

$$N_{aA} + N_{bA} = N; \quad N_{aB} + N_{bB} = N;$$

Одно из этих соотношений — следствие трех других. Вследствие этих соотношений лишь одна из величин N_{aA} , N_{aB} , N_{bA} , N_{bB} может считаться независимой.

Статистический вес состояния с заданными числами атомов в подрешётках

$$\Gamma = C_N^{N_{aA}} C_N^{N_{aB}} = \frac{N!}{N_{aA}! N_{bA}!} \frac{N!}{N_{aB}! N_{bB}!},$$

энтропия $S = \ln \Gamma$.

Мы учитываем взаимодействие только атомов, находящихся в соседних кристаллических ячейках (а потому — в разных подрешётках). Энергию взаимодействия „меди — меди“ обозначаем V_{aa} (причем $V_{aa} < 0$), подобным же образом введены V_{ab} , V_{bb} . Предполагаем, что справедливо условие $V = V_{aa} + V_{bb} - 2V_{ab} > 0$ ¹⁹, благодаря которому состояние кристалла, с атомами меди и цинка, находящимися полностью в разных подрешётках (и таким образом оказавшимися ближайшими соседями), имеет наименьшую энергию связи. (Это состояние либо с $N_{aA} = N_{bB} = N$, либо с $N_{aA} = N_{bB} = 0$ — в последнем случае подрешётки заслуживали бы переименования.)

Для определения энергии посмотрим сначала, сколько каких соседей может оказаться у атома меди, находящегося в „медной“ подрешётке. Число ближайших соседей обозначим q (в нашем случае $q = 8$). Среднее число атомов меди на q местах в соседней подрешётке равно $q \frac{N_{aB}}{N}$, среднее число атомов цинка — $q \frac{N_{bB}}{N}$. Среднее значение энергии взаимодействия с соседями для данного атома меди $q \frac{N_{aB}}{N} V_{aa} + q \frac{N_{bB}}{N} V_{ab}$.

Энергия взаимодействия всех атомов

$$E = N_{aA} \left(q \frac{N_{aB}}{N} V_{aa} + q \frac{N_{bB}}{N} V_{ab} \right) + N_{bA} \left(q \frac{N_{aB}}{N} V_{ba} + q \frac{N_{bB}}{N} V_{bb} \right).$$

Переход от частичного порядка в размещении атомов по подрешёткам к полному беспорядку происходит при условии, что числа атомов меди в обеих подрешётках станут одинаковы. Параметр порядка η вводим таким образом, чтобы он обращался в нуль при $N_{aA} = N_{aB}$:

$$N_{aA} - N_{aB} = \eta N.$$

¹⁹ При $V < 0$ энергетически выгодным было бы расслоение смеси на вещества „a“ и „b“.

(Множитель N обеспечивает такую нормировку параметра η , что он будет обращаться в 1 или -1 при „полном порядке“.) Подставив в E

$$N_{aA} = N_{bB} = N \frac{1+\eta}{2}, \quad N_{bA} = N_{aB} = N \frac{1-\eta}{2},$$

получаем

$$E = E_0 - Nq \frac{V}{4} \eta^2. \quad (268)$$

Равновесное значение параметра порядка η определяется из условия

$$\frac{\partial F}{\partial \eta} = 0.$$

Учитывая, что $\delta N_{aA} = \delta N_{bB} = N \frac{\delta \eta}{2}$, $\delta N_{bA} = \delta N_{aB} = -N \frac{\delta \eta}{2}$, получаем

$$-\frac{1}{2} V \eta N q + TN \ln \frac{1+\eta}{1-\eta} = 0.$$

Вблизи точки фазового перехода $\eta \ll 1$, так что можно представить $\ln \frac{1+\eta}{1-\eta}$ в виде $2 \left(\eta + \frac{\eta^3}{3} \right)$:

$$\eta \left(-\frac{qV}{2} + 2T \left(1 + \frac{\eta^2}{3} \right) \right) = 0 \quad (269)$$

Малое, но отличное от нуля значение η появляется при температуре $T < T_k = \frac{Vq}{4}$. Выразив η^2 из (269): $\eta^2 \approx 3(T_k - T)/T_k$ и подставив в (268), находим $E = E_0 + 3N(T_k - T)$. Скачок теплоёмкости $\Delta C = \frac{dE}{dT} \Big|_{T=T_k+0} - \frac{dE}{dT} \Big|_{T=T_k-0} = -3N$.

На рис. 28, 29 изображены зависимости $\eta(T)$, $C(T)$, получаемые из приведённых уравнений. Разумеется приводимая величина $C(T)$ — это только добавка к теплоёмкости кристалла, связанной с колебаниями кристаллической решётки, (см. также [9, гл. 5, пример 2], [8, § 78].)

Задача 110.

Найти скачок теплоемкости латуни состава $Cu_{1+k}Zn_{1-k}$ в точке упорядочения сплава.

Задача 111.

Модель перехода „спираль – клубок“ в длинной молекуле.

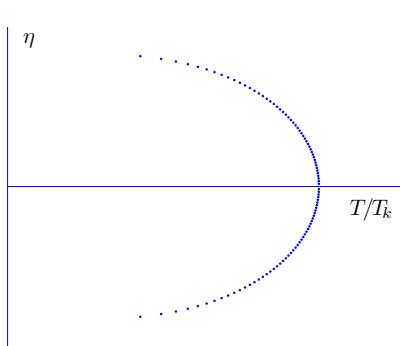


Рис. 28. Параметр порядка упорядочивающегося сплава в зависимости от температуры. Приближение среднего поля

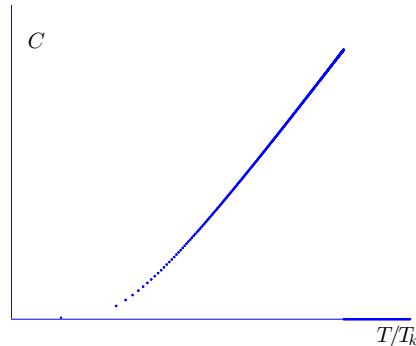


Рис. 29. Теплоёмкость, связанная с упорядочением сплава в зависимости от температуры. Приближение среднего поля

Рассматривается молекула, имеющая форму „лестницы“ (подобной двойной спирали ДНК). Каждая ступенька может находиться в одном из двух состояний — „целом“ и „разорванном“. Энергия, необходимая для разрыва, равна ε .

Если две разорванных ступеньки оказываются рядом, то область молекулы между ними приобретает значительную подвижность, так что число возможных конфигураций этой области становится равно $g \gg 1$. Появление „уединённого“ разрыва не ведёт к росту числа конфигураций. Число ступенек N очень велико. Можно считать молекулу замкнутой в кольцо.

Определить теплоёмкость молекулы и среднее число разорванных звеньев в зависимости от температуры.

Решение:

Задачу можно рассматривать как вариант одномерной задачи Изинга и воспользоваться таким же подходом к ее решению, как в [8, § 80], [12, п. 9.2.2].

Мы будем вычислять статистическую сумму для молекулы. Каждое слагаемое может быть представлено как произведение вкладов отдельных „звеньев“ (участков молекулы между ступеньками), $A(1)A(2) \dots A(N)$; вклад от статистического веса конфигураций участка молекулы между ступеньками мы будем включать в множитель, отвечающий звену,

следующему за этим участком. Перебирая звенья по порядку, мы будем, таким образом, учитывать, что вклад i -го звена в статистическую сумму, $A(i)$, зависит не только от состояния этого звена, но и состояния звена предыдущего, $(i-1)$ -го (а для первого — от состояния последнего). Обозначив состояние целого звена $\sigma = 0$, а состояние разорванного $\sigma = 1$, мы сведем все возможные значения $A(i)$ в таблицу (матрицу):

$\sigma_{i-1} \backslash \sigma_i$	0	1
0	1	$e^{-\varepsilon/T}$
1	1	$ge^{-\varepsilon/T}$

В первом столбце стоят две единицы, отвечающие целому состоянию i -го звена, $e^{-\varepsilon/T}$ в верхней строке второго столбца отвечает необходимости затратить энергию ε для разрыва этого звена, наконец, последний элемент матрицы содержит добавочный множитель g , отвечающей свободе участка молекулы между $(i-1)$ -м и i -м звеньями, возникшей из-за свободы обоих этих звеньев. Элементы матрицы обозначим $A_{\sigma_{i-1}, \sigma_i}$. Статистическая сумма

$$Z = \sum_{\sigma_1=0,1} \sum_{\sigma_2=0,1} \dots \sum_{\sigma_N=0,1} A_{\sigma_1, \sigma_2} A_{\sigma_2, \sigma_3} \dots A_{\sigma_N, \sigma_1}$$

получается суммированием по обоим возможным состояниям каждой из ступенек.

Выражение Z сводится к следу N -й степени матрицы A :
 $Z = \text{Sp}(A^N)$. Для его вычисления достаточно найти собственные значения матрицы A из уравнения:

$$\begin{vmatrix} 1 - \lambda & e^{-\varepsilon/T} \\ 1 & ge^{-\varepsilon/T} - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left[1 + ge^{-\varepsilon/T} \pm \sqrt{(1 - ge^{-\varepsilon/T})^2 + 4e^{-\varepsilon/T}} \right]. \quad (270)$$

$$Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N \approx \lambda_1^N.$$

Свободная энергия

$$F = -NT \ln \lambda_1.$$

Очевидно, что зависимость свободной энергии от температуры, а вместе с ней и других термодинамических величин, не имеет скачков. Однако

имеются интервалы температуры, где эта зависимость окажется очень резкой. Для качественного выяснения зависимости $F(T)$ заметим, что как при достаточно низких температурах, так и при достаточно высоких — вторым слагаемым под корнем в формуле (270) можно пренебречь. Переход от значения $\lambda_1 \approx 1$ к значению $\lambda_1 \approx ge^{-\varepsilon/T}$ происходит в узком интервале температур, когда оба слагаемых под корнем имеют один порядок величины. Это интервал температуры δT в окрестности того ее значения T_0 , при котором $ge^{-\varepsilon/T} = 1$, т. е.

$$T_0 \sim \frac{\varepsilon}{\ln g}. \quad (271)$$

Из условия $1 - ge^{-\varepsilon/(T_0 + \delta T)} = \pm 2e^{-\varepsilon/2T_0}$ получаем оценку

$$\delta T \sim \frac{4\varepsilon}{\sqrt{g} \ln^2 g}. \quad (272)$$

В таком (очень узком) интервале температур происходит „плавление“ молекулы — разрыв связей почти во всех звеньях. Резкое сужение интервала перехода от связанного состояния звеньев к разорванному, обусловленное взаимодействием многих звеньев цепочки друг с другом, биофизики называют кооперативным эффектом.

Очевидно, как вычисляется теплоёмкость цепочки (ее часть, связанная с разрывом или восстановлением связей в звеньях):

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}, \quad C = T \frac{\partial S}{\partial T}.$$

Доля разорванных ступенек может быть вычислена, как нетрудно сообразить, по формуле

$$N^* = -\left(\frac{\partial F}{\partial \varepsilon}\right)_T,$$

а доля тех разорванных ступенек, которые имеют разорванной соседнюю ступеньку, по формуле

$$N^{**} = \frac{g}{\lambda} \left(\frac{\partial \lambda}{\partial g}\right)_T.$$

На рис. 30 представлена зависимость теплоёмкости молекулы от температуры (в расчете на одно звено). Там же изображена для сравнения

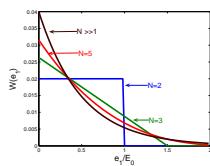


Рис. 30. Теплоёмкость длинной молекулы с взаимодействием соседних звеньев. Пунктиром показана теплоёмкость двухуровневой системы с сильно вырожденным верхним уровнем

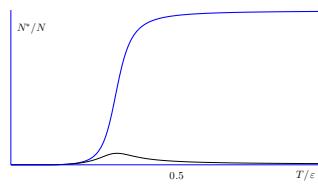


Рис. 31. Доля разорванных связей. Тонкая линия — доля в том числе одиночных разорванных связей

зависимость от температуры теплоёмкости двухуровневой системы с высоко вырожденным верхним уровнем.

(Для графиков принято значение $g = 20$. Дифференцирование при построении графиков проводилось численно.) В обоих случаях область перехода существенно смешена в сторону температур, более низких, чем энергия возбуждения ϵ . Как и следовало ожидать, для молекулы с взаимодействием между звеньями интервал перехода в возбужденное состояние оказывается сокращен гораздо сильнее, чем просто при вырождении верхнего уровня.

На рис. 31 представлена зависимость от температуры доли разорванных связей N^*/N , тонкой кривой — доля одиночных связей, т. е. не имеющих разорванных звеньев — соседей, $(N^* - N^{**})/N$.

Молекула белка представляет собой очень длинную цепочку аминокислот, имеющую в связанном состоянии форму винтовой линии. Такую форму цепочки удерживают слабые химические связи аминокислот друг с другом (так называемые *водородные связи*). Эта форма молекулы белка называется α -спираль. При разрыве большинства указанных водородных связей молекула становится гибкой длинной цепочкой (почти нитью), запутывается и получается „клубок“. Аналогичный переход имеет место для молекул ДНК. Для реальных белков и ДНК величина δT оказывается порядка 1К, а $T_0 \sim 90^\circ\text{C}$. Оценка по этим данным величины g согласно (271),(272) дает $g \sim 260$. Оценка согласно (271)

$\varepsilon \sim 2\ 000$ К неплохо соответствует энергии водородной связи (учитывая грубость как модели, так и способа оценки).²⁰

О сопоставлении результатов расчета с экспериментальными данными и об уточнении моделей можно прочесть, например, в ([20, § 4.5, 8.4], [10, гл. 8, § 2]).

Решение (другой вариант):

Приведем другой вариант решения этой задачи. Вблизи точки плавления имеются n областей разорванных и такое же число областей целых связей. Обозначим полное число разорванных связей N_1 , а целых – N_2 (при этом $N_1 + N_2 = N$ – полное число всех связей). Энергию целой связи выберем равной нулю, ее статистический вес равен $\Gamma = 1$. Энергию разорванной связи обозначим ε , ее статистический вес $\Gamma = g$, если соседние звенья также разорваны. Если же соседние звенья связаны, то $\Gamma = 1$. Статистический вес размещения n областей разорванных звеньев есть $\Gamma_1 = N_1! / ((N_1 - n)!n!)$, связанных – $\Gamma_2 = N_2! / ((N_2 - n)!n!)$. Тогда свободная энергия всей системы есть

$$F = N_1 f_1 + n f_m - T \left[\ln \frac{N_1!}{(N_1 - n)!n!} + \ln \frac{N_2!}{(N_2 - n)!n!} \right],$$

где $f_1 = \varepsilon - T \ln g$ – свободная энергия разорванной связи, когда ее окружают также разорванные связи, $f_m = \varepsilon$ – свободная энергия разорванной связи, когда соседняя связь целая. Минимизируя свободную энергию по N_1 и n , получаем два уравнения

$$\frac{N_2}{N_2 - n} \frac{N_1 - n}{N_1} = \frac{1}{g} e^{\varepsilon/T} \equiv a, \quad \frac{n^2}{(N_1 - n)(N_2 - n)} = e^{-\varepsilon/T} \equiv b.$$

Обозначим долю целых связей $\theta = N_2/N$. Тогда из двух уравнений

$$\frac{1 - 2\theta}{\sqrt{\theta(1 - \theta)}} = \frac{a - 1}{\sqrt{ab}} = \sqrt{g} \left(\frac{1}{g} e^{\varepsilon/T} - 1 \right).$$

Отсюда получаем температуру перехода T_0 , соответствующую $\theta = 1/2$, т. е. $a = 1$, равной

$$T_0 = \frac{\varepsilon}{\ln g},$$

²⁰ Если принять, что получивший подвижность участок молекулы содержит 4 отрезка, каждый из которых может принимать по 4 разных положения, то получаем $g = 4^4 = 256$. Энергия водородной связи $\sim 4\ 500$ К.

а интервал температур δT , в котором происходит плавление

$$\delta T \sim \frac{1}{d\theta/dT} \Big|_{T=T_0} \sim \frac{4\varepsilon}{\sqrt{g}(\ln g)^2}.$$

Решение (еще один вариант):

Рассмотрим фрагмент цепи, состоящий из m связанных звеньев (статистический вес $\Gamma = 1$, энергия $E = 0$), n разорванных звеньев (статистический вес $\Gamma = g$, энергия $E = \varepsilon$) и переходной области (статистический вес $\Gamma = 1$, энергия $E = \varepsilon$). Вероятность найти такую конфигурацию есть

$$P(n, m) = \frac{1}{Z} \sigma e^{n(\ln g - \varepsilon/T)},$$

где $\sigma \equiv \exp(-\varepsilon/T)$. Статсумму Z представим как $Z = \lambda^{n+m}$, так что свободная энергия на одно звено цепи есть $f = -T \ln \lambda$. Введем обозначение $s = g \exp(-\varepsilon/T)$ и запишем условие нормировки вероятности

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} P(n, m) = \sigma \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda^m} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{s}{\lambda}\right)^n = 1.$$

Откуда получаем

$$\lambda = \frac{1}{2} \left[(s+1) + \sqrt{(s-1)^2 + 4\sigma s} \right],$$

что совпадает с формулой (270) вблизи точки перехода.

14. Флуктуации

Задача 112. Выразить флуктуации числа частиц в большом каноническом ансамбле, используя большую статистическую сумму.

Решение:

[1, § 112, § 113, задача]. Большая статистическая сумма

$$Q = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\mu N/T} Z_N$$

выражается через статсуммы Z_N для N частиц, а вероятность иметь в системе N частиц $w_N = e^{\mu N/T} Z_N / Q$. Поэтому

$$\langle N \rangle = \frac{1}{Q} \sum_{N=0}^{\infty} N w_N = \frac{T}{Q} \left(\frac{\partial Q}{\partial \mu} \right),$$

$$\langle N^2 \rangle = \frac{1}{Q} \sum_{N=0}^{\infty} N^2 w_N = \frac{T^2}{Q} \left(\frac{\partial^2 Q}{\partial \mu^2} \right),$$

откуда

$$T \frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu} = T^2 \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{1}{Q} \frac{\partial Q}{\partial \mu} \right) = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = \langle \Delta N^2 \rangle.$$

Для идеального больцмановского газа

$$\mu = T \ln \frac{z}{N}, \quad N = e^{\mu/T} z, \quad \frac{\langle (\Delta N)^2 \rangle}{\langle N \rangle^2} = \frac{1}{N}.$$

Для идеального ферми-газа ($T \ll \mu$)

$$\mu = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3}, \quad \frac{\langle \Delta N^2 \rangle}{\langle N \rangle^2} = \frac{3T}{2N\mu} \propto \frac{T}{N^{5/3}},$$

— относительные флуктуации числа частиц стремятся к нулю с понижением температуры и убывают с ростом полного числа частиц в системе гораздо быстрее чем для больцмановского газа. Малость флуктуаций обусловлена тем, что очень сильно подавлены флуктуации в состояниях вне энергетического интервала ширины T вблизи поверхности Ферми.

Задача 113. Выразить относительную величину флуктуаций интенсивности дневного света, рассматривая электромагнитное поле как классическое.

Решение:

Мгновенное значение электрического поля световой волны складывается из полей, излучённых множеством атомов:

$$\mathbf{E} = \sum_a \mathbf{E}_a.$$

Каждое из слагаемых \mathbf{E}_a изменяется с частотой $\omega \sim 10^{13}$ с, а за время, не большее $\tau \sim 10^{-7}$ с,²¹ полностью изменяет фазу θ_a и амплитуду, причем независимо от других.

Далее мы примем для определённости, что выделен свет линейно поляризованный.

²¹ Указанная в тексте оценка соответствует естественной ширине спектральной линии. Ближе к действительности оценка $\tau \sim 10^{-10}$ с — время между соударениями атомов.

Для мгновенного значения квадрата поля, определяющего плотность потока энергии,

$$\begin{aligned} E^2 &= \sum_a E_a \cos(\omega t + \theta_a) \sum_b E_b \cos(\omega t + \theta_b) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{a,b} E_a E_b (\cos(\theta_a - \theta_b) + \cos(2\omega t + \theta_a + \theta_b)). \end{aligned}$$

Интенсивность света определяется величиной E^2 , усреднённой за период $2\pi/\omega$ или за несколько таких периодов. За такое время амплитуды и фазы отдельных слагаемых заметно не изменяются, а слагаемое, осциллирующее с частотой 2ω при таком усреднении обратится в нуль. Поэтому „мгновенное“ значение интенсивности света

$$I \propto \frac{1}{2} \sum_{a,b} E_a E_b \cos(\theta_a - \theta_b).$$

Среднее значение интенсивности определится при усреднении за время, большее τ . При таком усреднении²² исчезнут все слагаемые с $a \neq b$, так как фазы излучений разных атомов θ_a за такое время изменяются независимо друг от друга: $\langle \cos(\theta_a - \theta_b) \rangle = 0$. Поэтому

$$\langle I \rangle \propto \frac{1}{2} \sum_a E_a^2 = \frac{1}{2} N \langle E_a^2 \rangle,$$

где N — число слагаемых, $\langle E_a^2 \rangle$ — средний (по разным атомам) квадрат поля излучения одного атома.

Чтобы найти флуктуацию интенсивности, нужно найти еще $\langle I^2 \rangle$.

$$\begin{aligned} I^2 &\propto \frac{1}{4} \sum_{a,b} E_a E_b \cos(\theta_a - \theta_b) \sum_{c,d} E_c E_d \cos(\theta_c - \theta_d) = \\ &= \frac{1}{8} \sum_{a,b,c,d} E_a E_b E_c E_d (\cos(\theta_a - \theta_b + \theta_c - \theta_d) + \cos(\theta_a - \theta_b - \theta_c + \theta_d)). \end{aligned}$$

²² Любой используемый детектор, даже самый „быстрый“, фактически производит такое усреднение. Подобным же образом „мгновенная“ величина давления газа определяется средним значением переданного стенке сосуда импульса за время, в течение которого происходит достаточно много столкновений молекул газа с этой стенкой.

При усреднении за время, много большее τ , сохраняются только слагаемые, в которых случайные фазы сокращаются. Это N слагаемых с $a = b = c = d$, для которых оба косинуса обращаются в единицу, и $2N(N - 1)$ слагаемых для которых первый косинус обращается в 1 (при $a = b \neq c = d$, и при $a = d \neq b = c$) и столько же — для второго косинуса (при $a = b \neq c = d$, и при $a = c \neq b = d$). Это дает в сумме

$$\langle I^2 \rangle = \frac{1}{4}N\langle E_a^4 \rangle + \frac{1}{2}N(N - 1)\langle E_a^2 \rangle^2.$$

Поскольку $N \gg 1$ первое слагаемое мало в сравнении со вторым, а во втором можно заменить $N(N - 1)$ на N^2 . В итоге

$$\langle I^2 \rangle = \frac{1}{2}N^2\langle E_a^2 \rangle^2,$$

так что

$$\frac{(\Delta I)^2}{\langle I \rangle^2} = \frac{\langle I^2 \rangle - \langle I \rangle^2}{\langle I \rangle^2} = 1.$$

Приведём еще один вариант решения. Мы несколько иначе опишем ту же физическую картину. Речь идет по-прежнему об одной линейно поляризованной моде колебаний.

Поле световой волны мы представляем в виде

$$E = \operatorname{Re} \left(\sum_a E_a e^{-i\omega t} \right), \quad (273)$$

где E_a — комплексная амплитуда поля излучения отдельного атома. Квадрат модуля комплексной амплитуды $E^{(0)} = \sum E_a$ определяет интенсивность волны, усреднённую за период.

Обратим внимание, что задаваемая уравнением (273) в комплексной плоскости картина для комплексной амплитуды колебания $E^{(0)}$ полностью совпадает с картиной смещения частицы при случайных блужданиях (число слагаемых отвечает числу шагов). Распределение вероятностей для каждой из величин $E' = \operatorname{Re}(E^{(0)})$ и $E'' = \operatorname{Im}(E^{(0)})$, представляющих собой сумму очень большого числа случайных слагаемых, гауссово:

$$dw(E') \propto \exp \left(-\frac{E'^2}{2\langle E'^2 \rangle} \right) dE', \quad dw(E'') \propto \exp \left(-\frac{E''^2}{2\langle E''^2 \rangle} \right) dE'',$$

Распределение вероятностей для величины $E^{(0)2} = E'^2 + E''^2$

$$dw \propto \exp\left(-\frac{E'^2 + E''^2}{2\langle E'^2 \rangle}\right) dE' dE'' \propto \exp\left(-\frac{E^{(0)2}}{\langle E^{(0)2} \rangle}\right) E^{(0)} dE^{(0)},$$

$$\langle E'^2 \rangle = \langle E''^2 \rangle, \quad \langle E^{(0)2} \rangle = 2\langle E'^2 \rangle.$$

Для интенсивности излучения I распределение такое же, как для $E^{(0)2}$

$$dw = \frac{1}{\langle I \rangle} e^{-I/\langle I \rangle} dI.$$

Поэтому

$$\langle I^2 \rangle = \frac{1}{\langle I \rangle} \int_0^\infty I^2 e^{-I/\langle I \rangle} dI = 2\langle I \rangle^2, \quad \langle (\Delta I)^2 \rangle = \langle I^2 \rangle - \langle I \rangle^2 = \langle I \rangle^2.$$

Заметим, что для видимого света в спектре солнечного излучения $\langle n \rangle = (e^{\hbar\omega/T} - 1)^{-1} \ll 1$, так что с точки зрения определения флюктуаций это излучение оказывается не классическим, а квантовым. Изложенное решение задачи фактически относится к инфракрасной области спектра, где $\langle n \rangle \gg 1$.

Найденная величина флюктуаций чрезвычайно велика, интенсивность изменяется на 100 %. Почему же Солнце и звезды не мигают? Если рассматривать не одну выделенную моду а много, скажем $G = \omega^2 \Delta\omega \Delta\Omega / 4\pi^3 \gg 1$ мод ($\Delta\omega$ — интервал частот, $\Delta\Omega$ — телесный угол, в котором сосредоточено наблюдаемое излучение), то нужно учитывать, что флюктуации их независимы. Складываются интенсивности $\mathcal{I} = GI$ и квадраты флюктуаций $(\Delta\mathcal{I})^2 = G(\Delta I)^2$. Тогда $(\Delta\mathcal{I})^2/\mathcal{I}^2 = 1/G \ll 1$.

Здесь уместно будет подчеркнуть также, что предварительное усреднение величины $E_x^2 \rightarrow I$ при переходе к величине интенсивности было весьма существенным. Если усреднять не I^2 , а E_x^4 , то результат будет зависеть от того, как реализовано „неполяризованное“ состояние.

Например, это может быть наложение взаимно некогерентных линейно поляризованных полей $E_x = E_0 \cos(\omega t + \theta_x)$ и $E_y = E_0 \cos(\omega t + \theta_y)$. Тогда $\langle E_x^4 \rangle = \frac{3}{8} E_0^4$.

В то же время для проекции электрического поля на ось x' , составляющую углы 45° с осями x и y , $E_{x'} = \frac{1}{\sqrt{2}}(E_x + E_y)$, получаем $\langle E_{x'}^4 \rangle = \frac{1}{4}(\langle E_x^4 \rangle + 4\langle E_x^3 E_y \rangle + 6\langle E_x^2 E_y^2 \rangle + 4\langle E_x E_y^3 \rangle + \langle E_y^4 \rangle) = \frac{9}{16} E_0^4$.

В опытах Брауна – Твисса изучается интерференция интенсивностей. Подумайте, происходит ли в этих опытах предварительное усреднение квадратов полей.

Задача 114. Найти флуктуации числа бозе-частиц на основном уровне в поле гармонического осциллятора для постоянного полного числа частиц в системе. [48]

Решение:

Буквальное применение известной формулы для флуктуации числа частиц

$$\overline{\Delta n_i^2} = n_i(1 + n_i) \quad (274)$$

для основного уровня при $T \rightarrow 0$ приводит к неправильному результату $\overline{\Delta N_0^2} \rightarrow N_0^2$ при $T \rightarrow 0$, поскольку, если мы рассматриваем систему с постоянным числом частиц (т.е. канонический, а не большой канонический ансамбль), флуктуации на основном состоянии должны стремиться к нулю с понижением температуры до нуля.

Разобъем всю систему на две подсистемы: основной уровень и все остальные возбужденные состояния. Теперь мы можем рассматривать подсистему, состоящую из возбужденных состояний, в формализме большого канонического ансамбля. Из условия $N_0 + N_e = N = Const$, где N_0 – число частиц на основном уровне, а N_e – на возбужденных, следует что

$$\overline{\Delta N_0^2} = \overline{\Delta N_e^2} = \frac{\partial^2 \ln Q_e}{\partial y^2}, \quad (275)$$

где Q_e – большая статсумма для возбужденных состояний и для краткости введено обозначение $y = \beta\mu$. Находим

$$\ln Q_e = \left(\frac{T}{\hbar\omega}\right)^3 b_4(y) \quad (276)$$

(как обычно при переходе от суммирования \sum_i по дискретным уровням к интегрированию, для гармонического осциллятора с плотностью состояний $\rho(\varepsilon) \sim \varepsilon^2$, теряется вклад основного состояния). Теперь для $T \leq T_0$, $\mu \rightarrow 0$ и

$$\bar{N}_e = \left(\frac{T}{\hbar\omega}\right)^3 b_3(0), \quad (277)$$

где температура бозе-конденсации T_0 определяется из условия

$$N = \left(\frac{T_0}{\hbar\omega}\right)^3 b_3(0), \quad (278)$$

так что

$$N_0 = N - \bar{N}_e = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_0} \right)^3 \right]. \quad (279)$$

Следовательно

$$\overline{\Delta N_0^2} = \overline{\Delta N_e^2} = \frac{\partial^2 \ln Q_e}{\partial y^2} = \left(\frac{T}{\hbar\omega} \right)^3 b_2(0). \quad (280)$$

Для относительных флуктуаций числа бозе-частиц на основном уровне в каноническом ансамбле при $T \ll T_0$ получаем выражение

$$\sqrt{\frac{\overline{\Delta N_0^2}}{\bar{N}_0^2}} \approx \left(\frac{T}{\hbar\omega} \right)^{3/2} \frac{\sqrt{b_2(0)}}{N} \quad (281)$$

Как и следовало ожидать, относительные флуктуации стремятся к нулю при $T \rightarrow 0$.

Решение (другой вариант):

Разобьем всю систему на две подсистемы: основной уровень и все остальные возбужденные состояния. Флуктуации числа частиц на возбужденных уровнях i , выражение для которых удобно представить в виде,

$$\overline{\Delta n_i^2} = T \left(\frac{\partial \bar{n}_i}{\partial \mu} \right) = -T \left(\frac{\partial \bar{n}_i}{\partial \varepsilon_i} \right) \quad (282)$$

являются независимыми

$$\overline{\Delta n_i \cdot \Delta n_j} = \delta_{ij} \overline{\Delta n_i^2}, \quad (283)$$

поэтому

$$\overline{\Delta N_0^2} = \overline{\Delta N_e^2} = \sum'_i \overline{\Delta n_i^2}, \quad (284)$$

где штрих у суммы означает, что суммирование идет только по возбужденным состояниям. Переходя от суммирования к интегрированию, получаем

$$\overline{\Delta N_0^2} = -\frac{T}{2(\hbar\omega)^3} \int_0^\infty \varepsilon^2 \left(\frac{\partial \bar{n}}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon, \quad (285)$$

что для температуры ниже точки бозе-конденсации дает, после интегрирования по частям,

$$\overline{\Delta N_0^2} = T \left(\frac{1}{\hbar\omega} \right)^3 \int_0^\infty \frac{\varepsilon d\varepsilon}{e^{\varepsilon/T} - 1} = \left(\frac{T}{\hbar\omega} \right)^3 b_2(0). \quad (286)$$

Задача 115. Идеальный бозе-газ, состоящий из N частиц, при температуре ниже температуры конденсации Бозе – Эйнштейна находится в однородном поле тяжести „над полом“. Найти флуктуации числа частиц в бозе-конденсате.

Решение:

Число частиц N_a в состоянии $|a\rangle$ микроскопически мало, поэтому газ с N частицами можно рассматривать как термостат и источник частиц для этого состояния. Флуктуации числа частиц в таком состоянии выражаются как

$$\langle(\Delta N_a)^2\rangle = T \frac{\partial N_a}{\partial \mu} \quad (287)$$

Число частиц в бозе-конденсате N_0 сопоставимо с N и определяется как

$$N_0 = N - \sum_{|a\rangle} N_a. \quad (288)$$

Естественно также, что²³

$$\langle N_0 \rangle = N - \sum_{|a\rangle} \langle N_a \rangle. \quad (289)$$

Флуктуации N_0 определяются флуктуациями N_a . При этом следует учесть, что флуктуации числа частиц в разных состояниях независимы:

$$\langle \Delta N_{a'} \Delta N_a \rangle = 0 \quad \text{при } a' \neq a.$$

Поэтому

$$\langle(\Delta N_0)^2\rangle = \sum_{|a\rangle} \langle(\Delta N_a)^2\rangle. \quad (290)$$

С учетом равенства (287)

$$\langle(\Delta N_0)^2\rangle = T \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{|a\rangle} \langle N_a \rangle = - \frac{\partial N_>}{\partial y}, \quad N_> = \sum_{|a\rangle} \langle N_a \rangle, \quad y = -\frac{\mu}{T}. \quad (291)$$

Среднее число частиц в состояниях с положительной энергией $N_>$ найдено ранее

$$N_> = \frac{(2m)^{3/2} T^{5/2}}{6\pi^2 \hbar^3 F} b_{3/2}(y),$$

²³ Если бы число частиц в данном объеме не было задано, то в этом равенстве стояло бы не N , а $\langle N \rangle$. Флуктуации же величины N_0 определялись бы согласно (287): $\langle(\Delta N_0)^2\rangle = N_0(1 + N_0)$.

так что

$$\langle(\Delta N_0)^2\rangle = \frac{(2m)^{3/2}T^{5/2}}{4\pi^2\hbar^3 F} b_{1/2}(0).$$

Случай, когда бозе-газ находится в ящике, более сложен, поскольку требует учета дискретности уровней энергии при $T < T_c$ когда $\mu \rightarrow 0$ ²⁴.

Взаимодействие частиц (которого мы не касаемся) может заметно подавить флуктуации.

Задача 116. Найти связь флуктуаций намагниченности с магнитной восприимчивостью.

Решение:

В магнитном поле h статсумма записывается в виде

$$Z = \sum_{S_i} e^{-\beta H + \beta h \sum_i S_i}. \quad (292)$$

Тогда намагниченность M определяется из соотношения

$$M = \langle \sum_i S_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{S_i} \left(\sum_i S_i \right) e^{-\beta H + \beta h \sum_i S_i} = \frac{T}{Z} \frac{\partial Z}{\partial h}. \quad (293)$$

Магнитная восприимчивость χ равна

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = T \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial h^2} = \frac{1}{T} \left[\langle \left(\sum_i S_i \right)^2 \rangle - \langle \sum_i S_i \rangle^2 \right] \quad (294)$$

Если вспомнить поведение магнитной восприимчивости вблизи критической точки, где она расходится, то из полученного выше выражения можно понять, что такое поведение связано с сильными корреляциями намагниченности вблизи критической точки.

Задача 117. Найти вероятность $P(N, V)$ что в объеме V будет находится N частиц при заданной средней плотности n_0 .

Решение:

Составим дифференциальное уравнение, записывая равенство

$$P(N, V+dV) = P(N-1, V) (n_0 dV) + P(N, V) (1 - n_0 dV) + O(dV^2), \quad (295)$$

²⁴ Авторы выражают благодарность С. Е. Коршунову, ИТФ им. Л. Д. Ландау, обратившего их внимание на этот факт

где первый член в правой части есть произведение вероятности найти в объеме V число частиц $N - 1$ на вероятность найти в физически бесконечно малом объеме dV одну частицу (поскольку $1/n_0$ – есть средний объем, приходящийся на одну частицу), а второй член имеет столь же очевидную физическую интерпретацию; посредством $O(dV^2)$ обозначены члены более высокого порядка малости, учитывающие возможность обнаружить в объеме dV две и более частиц. Тогда

$$\frac{\partial P(N, V)}{\partial V} = -n_0 [P(N, V) - P(N - 1, V)]. \quad (296)$$

Для частного случая вероятности $P(0, V)$ не найти ни одной частицы в объеме V уравнение принимает вид

$$\frac{\partial P(N, V)}{\partial V} = -n_0 P(N, V) \quad (297)$$

и имеет решение

$$P(0, V) = e^{-n_0 V} \quad (298)$$

В общем случае для производящей функции моментов

$$\phi(z, V) = \sum_{N=0}^{\infty} z^N P(N, V), \quad (299)$$

имеющей нормировку

$$\phi(z = 1, V) = \sum_{N=0}^{\infty} P(N, V) = 1, \quad (300)$$

имеем уравнение

$$\frac{\partial \phi(z, V)}{\partial V} = -n_0 \phi(z, V)(z - 1) \quad (301)$$

решением которого является

$$\phi(z, V) = e^{n_0 V(z-1)} \quad (302)$$

Следовательно мы получаем распределение Пуассона

$$P(N, V) = \frac{\bar{N}^N}{N!} e^{-\bar{N}}, \quad (303)$$

где $\bar{N} = n_0 V$ - среднее ожидаемое число частиц в объеме V . Также легко находится среднеквадратичное отклонение $\langle (N - \bar{N})^2 \rangle = \bar{N}$.

В пределе $\bar{N} \gg 1$ получается гауссово распределение. Действительно, представим $\bar{N}^N / N!$ в виде

$$\frac{\bar{N}^N}{N!} = e^{N \ln(\bar{N}) - \ln N!}$$

Функция $f(N) = N \ln(\bar{N}) - \ln N!$ имеет максимум при $N = N_0$, определяемый из условия $df/dN \approx \ln \bar{N} - \ln N_0 = 0$. Тогда, разлагая $f(N)$ в ряд до второго порядка вблизи максимума, получаем

$$P(N, V) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\bar{N}}} e^{-(N-\bar{N})^2/2\bar{N}}, \quad (304)$$

где перед экспоненциальным множителем получен из условия нормировки.

Задача 118. Оценить флуктуации заряда в плазме с температурой T .

Решение:

Вероятность $P(N, M)$ найти в объеме V число электронов N и число ионов M при ожидаемом среднем значении $N_0 = nV$ (n – средняя плотность частиц) пропорциональна

$$P(N, M) \sim \exp \left[-\frac{(N - N_0)^2}{2N_0} - \frac{(M - N_0)^2}{2N_0} - \frac{e^2(M - N)^2}{rT} \right],$$

где первые два члена найдены выше, а последний является оценкой вклада кулоновского взаимодействия (предполагая для простоты ионы однозарядными), $r \sim V^{1/3}$ – характерный линейный размер системы. Переходя к новым переменным $N - M$ и $N + M$ получим

$$P(N, M) \sim \exp \left[-\frac{(N - M)^2}{2} \left(\frac{1}{2N_0} + \frac{e^2}{rT} \right) - \frac{(M + M - 2N_0)^2}{4N_0} \right].$$

Таким образом имеем оценку

$$\langle \delta q^2 \rangle = e^2 \langle (N - M)^2 \rangle \sim \left(\frac{1}{rT} + \frac{1}{2e^2 N_0} \right)^{-1}.$$

В случае

$$\frac{1}{2e^2 N_0} = \frac{1}{2e^2 nV} \gg \frac{1}{rT}$$

флуктуации электронов и ионов независимы и описываются пуассоновской статистикой, так что $\langle \delta q^2 \rangle = 2e^2 N_0$. В обратном предельном случае

$$\frac{1}{2e^2 n V} \sim \frac{1}{e^2 n r^3} \ll \frac{1}{r T} \rightarrow r \gg \sqrt{\frac{T}{n e^2}} \sim \lambda_D \equiv \sqrt{\frac{T}{4\pi n e^2}}$$

флуктуации заряда сильно подавлены из-за кулоновского взаимодействия:

$$\frac{\langle \delta q^2 \rangle}{N_0^2 e^2} \sim \frac{1}{N_0} \frac{\lambda_D^3}{V}.$$

Отметим, что флуктуации суммарного числа электронов и ионов подчиняются пуассоновской статистике и в этом случае.

Задача 119. Найти квазистатические флуктуации $\langle (\Delta P \Delta T) \rangle, \langle \Delta V \Delta P \rangle, \langle \Delta V \Delta S \rangle$.

Решение:

Для описания термодинамической системы нужны две переменные. Выберем в качестве таковых объем V и температуру T . Тогда

$$\Delta S = \frac{C_v}{T} \Delta T + \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \Delta V, \quad \Delta P = \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \Delta T + \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T \Delta V, \quad (305)$$

так что

$$w \sim \exp \left[-\frac{1}{2T_0} \left(\frac{C_v}{T_0} (\Delta T)^2 - \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T (\Delta V)^2 \right) \right]. \quad (306)$$

Из этого выражения следует, что

$$\overline{(\Delta T)^2} = \frac{T_0^2}{C_v}, \quad \overline{(\Delta V)^2} = -T_0 \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T, \quad \overline{\Delta T \Delta V} = 0. \quad (307)$$

Полученных результатов достаточно для нахождения средних от флуктуаций других термодинамических переменных. Например,

$$\overline{\Delta T \Delta P} = \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V (\Delta T)^2 + \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T \overline{\Delta T \Delta V} = \frac{T^2}{C_v} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V > 0. \quad (308)$$

Естественно, что положительные флуктуации температуры сопровождаются положительными флуктуациями давления и наоборот.

$$\overline{\Delta V \Delta P} = \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T (\Delta V)^2 = -T \quad (309)$$

Опять очевидно, что увеличение объема приведет к уменьшению давления.

$$\overline{\Delta V \Delta S} = \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V (\Delta V)^2 = T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P > 0, \quad \overline{\Delta T \Delta S} = \frac{C_v}{T} (\Delta T)^2 = T > 0 \quad (310)$$

Последние два результата можно понять, вспоминая что при увеличении как температуры так и объема энтропия возрастает.

Задача 120. Найти квазистатические флуктуации $\langle (\Delta S)^2 \rangle$, $\langle (\Delta P)^2 \rangle$, $\langle \Delta S \Delta P \rangle$ в заданном объеме.

Задача 121. Найти квазистатические флуктуации энергии в объеме V , если объем тела и число частиц в нем фиксированы $\langle (\Delta E)_{V,N}^2 \rangle$, если объем может флуктуировать $\langle (\Delta E)_N^2 \rangle$, а число частиц фиксировано, в случае, если фиксирован объем, но переменно число частиц $\langle (\Delta E)_V^2 \rangle$.

Задача 122. Найти флуктуации объема Больцмановского газа, ограниченного поршнем, площади A , который удерживается пружиной жесткости k . Внешнее давление P_0 , температура T_0 . В равновесии пружина не растянута.

Решение:

$$\overline{(\Delta V)^2} = \frac{AT_0}{k - A \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T}$$

Задача 123. Найти отношение флуктуаций $\langle (\Delta V)_S^2 \rangle / \langle (\Delta V)^2 \rangle$ (определенное отношение интенсивности рассеянного света в „крыльях“ дублета Мандельштама – Бриллюэна к полной интенсивности рассеянного света).

Задача 124. Оценить связанную с флуктуациями параметра порядка добавку к теплоемкости вблизи точки фазового перехода второго рода. (Предполагается использование теории фазовых переходов Ландау с учетом зависимости параметра порядка от координат, в духе теории критической опалесценции Орнштейна и Цернике.)

Решение:

На некотором удалении от точки фазового перехода вероятность какого-либо значения параметра порядка η определяется потенциалом Ω ²⁵

$$w \propto e^{-\Omega/T}, \quad \Omega = V\phi, \quad \text{где } \phi = at\eta^2 + B\eta^4, \quad t = T - T_k.$$

²⁵ Наиболее вероятное значение η_0 параметра порядка определяется минимумом $\phi(\eta)$: $\eta_0 = 0$ при $t > 0$, $\eta_0 > 0$ при $t < 0$. В обоих случаях $\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \eta^2} \Big|_{\eta=\eta_0} \sim Va|t|$.

Величина флуктуаций параметра $\delta\eta$ определяется условием

$$\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \eta^2} (\delta\eta)^2 \sim a|t|(\delta\eta)^2 \sim T, \text{ откуда}$$

$$(\delta\eta)^2 \sim \frac{T}{Va|t|}. \quad (311)$$

При приближении к точке перехода флуктуации растут.

Согласно представлениям, введенным в физику Оринштейном и Цернике при изучении критической опалесценции, вещество вблизи критической точки разбивается на мелкие участки, на каждом из которых значение параметра порядка не зависит от его значения на других участках. Оценка (311) становится несправедлива, объем V следует заменить на размер такого участка, так что флуктуации параметра порядка оказываются гораздо большими, тем большими, чем мельче участки с определенными значениями η . Между ними имеются переходные области, в которых параметр η постепенно изменяется. С этим изменением параметра порядка связана энергия, которую можно понимать как поверхностную, связанную с наличием границ между участками с различными значениями η . Наличие такой энергии ограничивает измельчение участков с постоянными значениями η (и рост флуктуаций). Потенциал Ω , отражающий такое представление о структуре вещества вблизи точки фазового перехода второго рода, имеет вид

$$\Omega(T, P, \eta) = \int [\phi(T, P, \eta) + g(\nabla\eta)^2]dV, \text{ где } g = Const. \quad (312)$$

Параметр g фактически задает величину поверхностной энергии. Ширину области перехода $\sim R$ между участками с различными значениями параметра порядка можно оценить, принимая, что флуктуационная часть первого слагаемого подынтегрального выражения в (312) имеет тот же порядок, что второе слагаемое: $a|t|(\delta\eta)^2 \sim g(\delta\eta/R)^2$, откуда $R \sim (g/a|t|)^{1/2}$. Теперь можно оценить величину флуктуаций параметра порядка, принимая, что область перехода между участками вещества с различными значениями η простирается на всю возможную глубину этих участков (чтобы величина градиента в (312) была возможно меньше) и подставив в (311) в качестве объема $V \sim R^3$:

$$\delta\eta^2 \sim \frac{T(a|t|)^{1/2}}{g^{3/2}}. \quad (313)$$

Таким образом, указанная „поверхностная“ энергия подавляет рост флуктуаций параметра порядка по мере приближения к точке фазового перехода. (Подразумевается, что флуктуации η остаются велики по сравнению с оценкой (311)²⁶.)

Добавку к Ω , обусловленную флуктуациями η ,

$$\delta\Omega = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \eta^2} \right) (\delta\eta)^2$$

оцениваем как

$$\delta\Omega \sim VT_k \left(\frac{a|t|}{g} \right)^{3/2}.$$

Получая далее добавки к энтропии и теплоёмкости, дифференцируем только t , сохраняя тем самым лишь наибольшие слагаемые.

$$\delta S = -\frac{\partial}{\partial T} \delta\Omega \sim VT_k a^{3/2} |t|^{1/2} / g^{3/2},$$

$$\delta C = T \frac{\partial}{\partial T} \delta S \sim \frac{VT_k^2 a^{3/2}}{g^{3/2} |t|^{1/2}}.$$

При более тщательном расчете (см. [1, § 147, задача]) получается еще коэффициент $1/16\pi$. Более подробный рассказ о теории Орнштейна – Цернике см. также в учебнике [8, § 81].

Задача 125. Некоторые полимеры (например, молекул ДНК) на небольших участках длины хорошо описываются моделью слабо изгибающейся упругой нити с модулем Юнга E .

Найти функцию распределения вероятности найти конец цепи на расстоянии ρ от оси z , направленный под углом $\theta \approx d\rho/dz$, если начальный участок цепи помещен в начало координат и направлен вдоль оси z .

Решение:

Для небольших изгибов цепи изменением продольной длины можно пренебречь. В поперечном направлении полимерная цепь отклоняется в случайных направлениях, поэтому поперечные отклонения испытывают случайные блуждания.

²⁶ Иначе говоря, величина $|t|$ не слишком мала. Это согласуется с тем фактом, что область применимости теории Ландау задается условием $\delta\eta \ll \eta_0$, ограничивающим величину $|t|$ снизу.

Рассмотрим для начала движение в плоскости, скажем xz , где ось z выбрана вдоль первоначального направления цепи. Изменение смещения x в перпендикулярном к оси z направлении обусловлено многими случайными изгибами. На небольшом участке цепи Δz радиус кривизны $R \approx (d^2x/dz^2)^{-1}$ можно считать приближенно постоянным и вероятность такой конфигурации

$$G[z, x(z); z + \Delta z, x(z + \Delta z)] \sim \exp \left[-\frac{EI}{2T} \left(\frac{d^2x}{dz^2} \right)^2 \Delta z \right]. \quad (314)$$

Здесь x – смещение цепи от оси z , I – момент инерции, E – модуль Юнга, характеризующий упругость цепи (так что энергия изгиба на единицу длины $W/\Delta z = EI/2R^2$ [7, § 18]), T – температура среды, в которую помещена цепь. Величина T/EI есть среднеквадратичный угол изгиба цепи на единичной длине, который мы обозначим Θ_0^2 . Вероятность найти участки цепи с координатами $(x_1, z_1; x_2, z_2; \dots; x_N, z_N)$ дается произведением полученных выше вероятностей для каждого отрезка $(x_i, z_i; x_{i+1}, z_{i+1})$ и эта величина определяет вероятность данной траектории частицы (опуская пока вопрос о нормировке).

Если нас интересует лишь начальная и конечная точки траектории, то вклад какой-то конфигурации цепи пропорционален

$$G[0; z, \rho, \theta] \sim \exp \left[-\frac{1}{2\Theta_0^2} \int_0^z \left(\frac{d^2x}{ds^2} \right)^2 ds \right]. \quad (315)$$

На рис. 32 приведены данные моделирования упругой цепи, показывающие ее типичные конфигурации.

Наибольший вклад в вероятность (315) вносят конфигурации цепи (траектории), обеспечивающие минимум функционала

$$F[x(s)] = \int_0^z \left(\frac{d^2x}{ds^2} \right)^2 ds. \quad (316)$$

Приравнивая нулю вариацию этого функционала

$$\delta F[x(s)] = 2 \int_0^z \frac{d^4x}{ds^4} \delta x ds, \quad (317)$$

где мы дважды проинтегрировали по частям и использовали граничные условия

$$\frac{d\delta x}{ds} \Big|_{s=0,z} = \delta x(s) \Big|_{s=0,z} = 0, \quad (318)$$

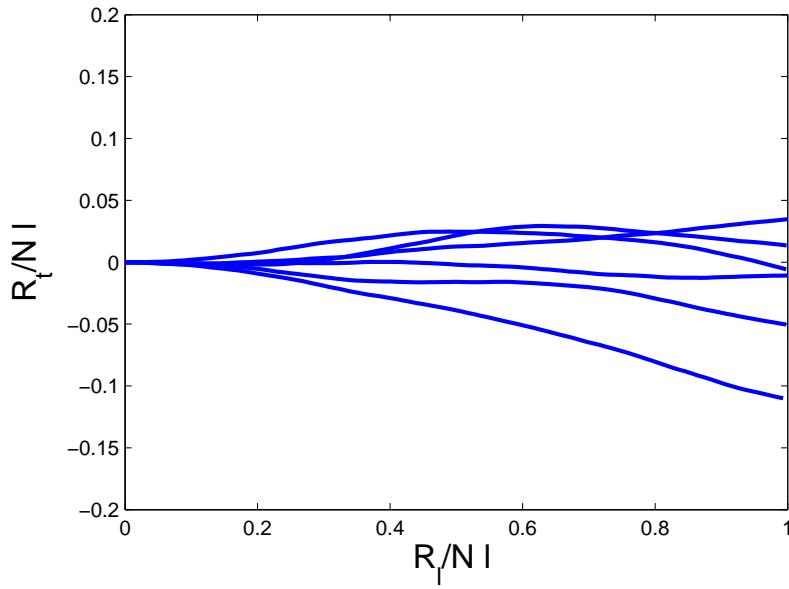


Рис. 32. Характерные конфигурации упругой цепи, один конец которой закреплен в начале координат и направлен по оси z , а другой конец свободен.

получим уравнение на траекторию $\bar{x}(s)$ (см. рис. 32), обеспечивающую минимум функционала F , в виде

$$\frac{d^4\bar{x}}{ds^4} = 0, \quad \rightarrow \quad \bar{x}(s) = As^3 + Bs^2, \quad (319)$$

где коэффициенты А и В находятся из условий

$$\delta\bar{x}\Big|_{s=z} = \rho, \quad \frac{d\bar{x}}{ds}\Big|_{s=z} = \theta \quad (320)$$

и равны

$$A = \frac{z\theta - 2\rho}{z^3}, \quad B = \frac{3\rho - z\theta}{z^2}. \quad (321)$$

Вычислив

$$\int_0^z \left(\frac{d^2\bar{x}}{ds^2} \right)^2 ds = 4(3A^2z^3 + 3ABz^2 + B^2z) = \frac{12}{z^3} \left(\rho - \frac{z\theta}{2} \right)^2 + \frac{\theta^2}{z}, \quad (322)$$

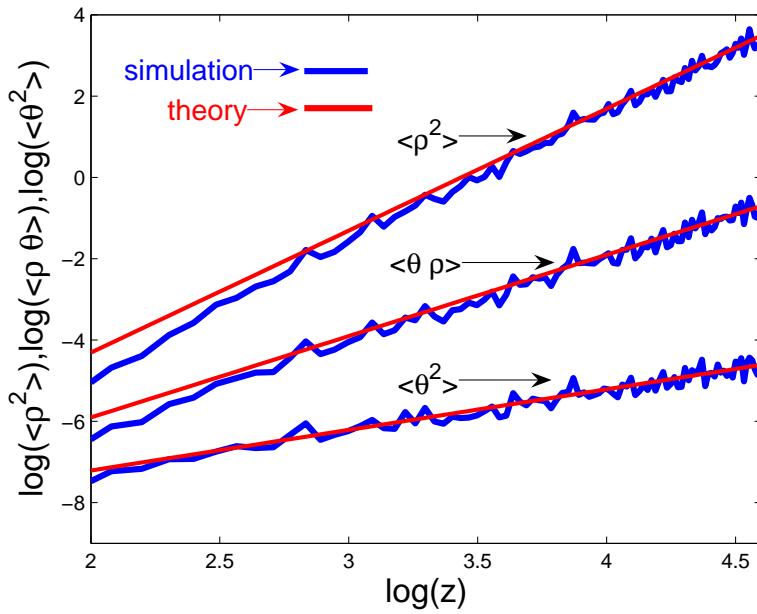


Рис. 33. Сравнение вычисленных корреляторов с результатами численного моделирования упругой цепи. Число звеньев цепи $N = 100$, длина звена $l = 1$.

получим

$$G(0; \rho, \theta, z) = \text{Const} \cdot \exp \left[-\frac{6}{\Theta_0^2 z^3} \left(\rho - \frac{z\theta}{2} \right)^2 - \frac{\theta^2}{2\Theta_0^2 z} \right]. \quad (323)$$

Найдем моменты функции распределения.

Интегрируя по новой переменной $\rho' = \rho - z\theta/2$, получим

$$\langle \theta_x^2 \rangle = \Theta_0^2 z. \quad (324)$$

Выделяя в выражении (323) полный квадрат по θ

$$G(0; \rho, \theta, z) = \text{Const} \cdot \exp \left[-\frac{2}{\Theta_0^2 z} \left(\theta - \frac{3\rho}{2z} \right)^2 - \frac{3\rho^2}{2\Theta_0^2 z^3} \right] \quad (325)$$

и интегрируя по $\theta' = \theta - 3\rho/2z$, получим

$$\langle \rho_x^2 \rangle = \frac{\Theta_0^2}{3} z^3. \quad (326)$$

Из выражения (323) находим

$$\langle \rho'^2 \rangle = \langle (\rho - z\theta/2)^2 \rangle = \frac{\Theta_0^2}{12} z^3, \quad (327)$$

так что получим

$$\langle \rho_x \theta_x \rangle = \frac{\Theta_0^2}{2} z^2. \quad (328)$$

На рис. 33 проведено сравнение данных численного моделирования с теоретическими для $\langle \rho_x^2 \rangle$, $\langle \rho_x \theta_x \rangle$, $\langle \theta_x^2 \rangle$.

15. Броуновское движение

Задача 126. Найти связь интенсивности флуктуаций случайной силы и вязкости для броуновской частицы, движение которой описывается уравнением Ланжевена.

Решение:

Если интересоваться движением броуновской частицы на достаточно больших временных масштабах, то влияние на частицу среды, в которой она движется, можно разбить на практически мгновенные некоррелированные толчки и усредненное по достаточно большим промежуткам времени воздействие, сводящееся к трению.

Рассмотрим одномерное уравнение Ланжевена

$$m \frac{dv}{dt} + \alpha v = F(t). \quad (329)$$

Для сферической частицы радиуса R коэффициент $\alpha = 6\pi\eta R$ определяется формулой Стокса. Случайной силе $F(t)$ приписываются следующие естественные статистические свойства

$$\langle F(t) \rangle = 0, \quad \langle F(t)F(t') \rangle = C\delta(t-t'), \quad (330)$$

где C – постоянная, которую мы определим позже. Здесь обозначение $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по ансамблю броуновских частиц.

Решаем уравнение Ланжевена методом вариации постоянной, представляя скорость частицы v в виде $v(t) = a(t) \exp(-\gamma t)$, получая

$$a(t) = \frac{1}{m} \int_0^t e^{\gamma t'} F(t') dt' + a_0, \quad (331)$$

откуда

$$v(t) = \frac{1}{m} e^{-\gamma t} \int_0^t e^{\gamma t'} F(t') dt' + v(0) e^{-\gamma t}. \quad (332)$$

Из этого выражения видно, что для времен $t \gg 1/\gamma$ начальное значение скорости "забывается". Найдем теперь среднее от произведения скоростей в два различных момента времени, называемое корреляционной функцией

$$\begin{aligned} \langle v(t)v(t+\tau) \rangle &= \frac{1}{m^2} e^{-2\gamma t - \gamma \tau} \int_0^{t+\tau} \int_0^t e^{\gamma(t'+t'')} C \delta(t' - t'') dt' dt'' = \\ &= \frac{C}{m^2} e^{-\gamma \tau} \left(\frac{1 - e^{-2\gamma t}}{2\gamma} \right)_{t \gg 1/\gamma} \rightarrow \frac{C}{2m^2 \gamma} e^{-\gamma \tau} \end{aligned} \quad (333)$$

Константу C можно найти из условия, что в равновесии $\langle v^2 \rangle = T/m$. В результате получаем

$$= 2\gamma m T = 12\pi R \eta T \quad (334)$$

одну из форм флюктуационно-диссипационной теоремы (флюктуации силы, C , связаны с диссипацией, вязкостью η).

Задача 127. Найти, как зависит от времени средний квадрат размежа области, занятой „облаком“ броуновских частиц, которые стартовали одновременно из одной точки.

Решение:

Поскольку $\mathbf{r}(t) = \int_0^t dt_1 \mathbf{v}(t_1)$, получаем

$$\langle r^2(t) \rangle = \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle \mathbf{v}(t_1) \mathbf{v}(t_2) \rangle.$$

Учтя, что

$$\langle \mathbf{v}(t_1) \mathbf{v}(t_2) \rangle = 3 \frac{T}{m} e^{-|t_1 - t_2|/\tau},$$

где $\tau = m/\alpha$, α — коэффициент пропорциональности силы трения частицы и её скорости, находим

$$\langle r^2(t) \rangle = 6 \frac{T}{m} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 e^{(-t_1+t_2)/\tau} = 6 \frac{T}{m} [\tau t - \tau^2 (1 - e^{-t/\tau})].$$

Для времени $t \ll \tau$

$$\sqrt{\langle r^2(t) \rangle} = \sqrt{\frac{3T}{m}} t = v_T t, \quad (335)$$

что соответствует свободному движению частиц с тепловой скоростью.

Для времени $t \gg \tau$

$$\langle r^2(t) \rangle = \frac{6T\alpha}{m} t, \quad (336)$$

и движение частиц — это случайные блуждания (см. также [9, гл. 6, задача 13], [12, п. 11.1]).

Задача 128. Найти корреляционные функции $\langle x(t')x(t'+t) \rangle$, $\langle v(t')x(t'+t) \rangle$ и $\langle v(t')v(t'+t) \rangle$, ($v = \dot{x}$) для осциллятора с трением.

Решение:

Обозначим

$$\begin{aligned} \varphi(t_1 - t_2) &= \langle x(t_1)x(t_2) \rangle, \\ \chi(t_1 - t_2) &= \langle v(t_1)x(t_2) \rangle, v = \dot{x}, \\ \psi(t_1 - t_2) &= \langle v(t_1)v(t_2) \rangle. \end{aligned}$$

Уравнение движения для корреляционной функции $\varphi(t_1 - t_2)$ получаем, умножив уравнение движения осциллятора:

$$\ddot{x} + 2\gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = f_{\text{сл}}/m, \quad (\omega^2 = \omega_0^2 - \gamma^2)$$

для $x(t_1)$ на $x(t_2)$ и усреднив по множеству осцилляторов:

$$\frac{\partial^2}{\partial t_1^2} \varphi(t_1 - t_2) + 2\gamma \frac{\partial}{\partial t_1} \varphi(t_1 - t_2) + \omega_0^2 \varphi(t_1 - t_2) = \langle f_{\text{сл}}(t_1)x(t_2) \rangle / m.$$

Для $t_1 > t_2$ берем значение случайной силы в момент **после** наблюдения смещения осциллятора, поэтому $\langle f_{\text{сл}}(t_1)x(t_2) \rangle = 0$. Для $t = t_1 - t_2 > 0$

$$\ddot{\varphi} + 2\gamma\dot{\varphi} + \omega_0^2 \varphi = 0.$$

Решение этого уравнения (для $t > 0$)

$$\varphi(t) = e^{-\gamma t}(A \cos \omega t + B \sin \omega t).$$

Дифференцируя по t , получим и другие корреляционные функции.

Чтобы найти постоянные A, B , рассмотрим функцию χ при малых $t_1 - t_2$. В этом случае можно не учитывать влияния на движение осциллятора сил (как возвращающей, так и случайной) и принять $x(t_2) = x(t_1) + v(t_1)(t_2 - t_1)$. Для функции χ это дает при $t \rightarrow 0$

$$\chi(t) = \langle v(t_1)x(t_1) \rangle + \langle v^2(t_1) \rangle (t_2 - t_1).$$

Учтём далее²⁷, что

$$\langle v(t_1)x(t_1) \rangle = \frac{1}{2} \left\langle \frac{d}{dt_1} x^2(t_1) \right\rangle = 0,$$

а также

$$\langle v^2(t_1) \rangle = \frac{T}{m}.$$

Для

$$\chi = \dot{\varphi} = e^{-\gamma t} ((-\gamma A + \omega B) \cos \omega t - (\omega A + \gamma B) \sin \omega t)$$

это приводит к уравнениям

$$-\gamma A + \omega B = 0, \quad -\omega(\gamma B + \omega A) = \frac{T}{m},$$

откуда

$$A = -\frac{T}{m\omega_0^2}, \quad B = \frac{\gamma}{\omega} A.$$

Учтя также, что $\varphi(-t) = \varphi(t)$, $\chi(-t) = -\chi(t)$, $\psi(-t) = \psi(t)$, получаем в итоге

$$\langle x(t')x(t' + t) \rangle = (T/m\omega_0^2)(\cos \omega t + (\gamma/\omega) \sin \omega|t|)e^{-\gamma|t|},$$

$$\langle v(t')x(t' + t) \rangle = (T/m\omega) \sin \omega t e^{-\gamma|t|},$$

$$\langle v(t')v(t' + t) \rangle = (T/m)(\cos \omega t - (\gamma/\omega) \sin \omega|t|)e^{-\gamma|t|}.$$

²⁷ Для того чтобы доказать, что среднее значение производной по времени от ограниченной функции равно нулю, мы принимаем, не акцентируя на этом внимания, что среднее по ансамблю не отличается от среднего по времени.

Задача 129. Найти флуктуации напряжения на концах сопротивления – проводника длиной L , поперечным сечением S , в котором хаотически движется N электронов проводимости, рассматриваемые как броуновские частицы.

Решение:

Плотность тока, создаваемая движением электронов

$$j(t) = ne\bar{v}(t) = \frac{ne}{N} \sum_{i=1}^N v_i(t) \quad (337)$$

Корреляционная функция плотности тока равна

$$\langle j(t')j(t'') \rangle = \frac{n^2 e^2}{N^2} \sum_i \sum_j \langle v(t')v(t'') \rangle = \frac{n^2 e^2}{N^2} N \frac{T}{m} e^{-|t'-t''|/\tau}, \quad (338)$$

где $\tau = 1/\gamma$ – время свободного пробега электрона (типично $\tau \sim 10^{-13}$ с). Тогда корреляционная функция напряжения на концах сопротивления равна

$$\langle U(t')U(t'') \rangle = R^2 S^2 \langle j(t')j(t'') \rangle = \frac{R^2 S^2 n^2 e^2}{N} \frac{T}{m} e^{-|t'-t''|/\tau}, \quad (339)$$

Выразим величину сопротивления R через характерное время между столкновениями электрона τ , находя установившуюся среднюю скорость движения электронов во внешнем электрическом поле E .

$$\frac{\bar{v}}{\tau} = \frac{eE}{m} \rightarrow j = \frac{ne^2 \tau}{m} E \rightarrow R = \frac{Lm}{Sne^2 \tau} \quad (340)$$

Подставляя это выражение для одной степени R в предыдущее уравнение, получим

$$\langle U(t')U(t'') \rangle = RT \frac{e^{-|t'-t''|/\tau}}{\tau}. \quad (341)$$

Если нас будут интересовать корреляции на промежутках времени $|t' - t''| \gg \tau$, что типично для радиотехнических цепей, то мы можем совершить предельный переход

$$\left[\frac{e^{-|t'-t''|/\tau}}{\tau} \right]_{\tau \rightarrow 0} \rightarrow 2\delta(t' - t''), \quad (342)$$

получая формулу Найквиста

$$\langle U(t')U(t'') \rangle = 2RT\delta(t' - t''). \quad (343)$$

Задача 130. Найти коррелятор скорости броуновской частицы, решая уравнения Ланжевена методом фурье-преобразования.

Решение:
Из уравнения Ланжевена для броуновской частицы

$$\frac{dv}{dt} + \gamma v = \frac{F(t)}{m} \quad (344)$$

используя фурье-преобразование

$$v(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} v(t)e^{i\omega t} dt, \quad F(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(t)e^{i\omega t} dt, \quad (345)$$

получим

$$v(\omega) = \frac{F(\omega)}{m(i\omega + \gamma)} \quad (346)$$

Определим так называемую спектральную плотность соотношением

$$S_F(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \langle |F(\omega)|^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d(\Delta t) \langle F(t)F(t + \Delta t) \rangle e^{i\omega\Delta t}. \quad (347)$$

Тогда корреляционная функция находится из спектральной плотности с помощью обратного фурье-преобразования

$$\langle F(t)F(t + \Delta t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} S_F(\omega) e^{-i\omega\Delta t}. \quad (348)$$

Для броуновской частицы

$$\langle F(t)F(t + \Delta t) \rangle = \delta(\tau) \rightarrow S_F(\omega) = C \quad (349)$$

Используя полученную выше связь фурье-компонент скорости и силы, мы можем выразить спектральную плотность скорости через спектральную плотность силы

$$S_v(\omega) = \frac{S_F(\omega)}{m^2(\omega^2 + \gamma^2)} \quad (350)$$

Корреляционная функция скорости тогда получается равной

$$\langle v(t)v(t+\Delta t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{C}{m^2(\omega^2 + \gamma^2)} e^{-i\omega\Delta t}. \quad (351)$$

Этот интеграл берется методом контурного интегрирования в комплексной плоскости, замыкая для $\Delta t > 0$ контур в нижней, а для $\Delta t < 0$ в верхней полуплоскости, получая

$$\langle v(t)v(t+\Delta t) \rangle = \frac{C}{2m\gamma} e^{-\gamma|\Delta t|} \quad (352)$$

Задача 131. Найти спектральную плотность корреляций напряжения на концах сопротивления, находящегося при температуре T , с учетом конечности времени τ между столкновениями для электронов.

Решение:

Мы получили

$$\langle U(t')U(t'') \rangle = RT \frac{e^{-|t'-t''|/\tau}}{\tau}. \quad (353)$$

Тогда имеем

$$S_U(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{RT}{\tau} e^{-|\Delta t|/\tau} e^{i\omega\Delta t} d(\Delta t) = \frac{2RT}{\omega^2\tau^2 + 1} \quad (354)$$

– так называемый белый шум, обрезаемый на верхней граничной частоте $\omega_0 \sim 1/\tau$.

Задача 132. Контур состоит из двух сопротивлений R_1 и R_2 , температуры которых равны T_1 и T_2 , и конденсатора ёмкости C , соединенных параллельно. Найти автокорреляционную функцию тока, идущего через конденсатор.

Решение:

$$\langle i(t_1)i(t_2) \rangle = \frac{R_1T_1 + R_2T_2}{R_1R_2} \left(-\frac{1}{RC} e^{-|t_1-t_2|/RC} + \delta(t_1 - t_2) \right),$$

где

$$R = \frac{R_1R_2}{R_1 + R_2}.$$

Задача 133. Контур состоит из двух сопротивлений R_1 и R_2 , температуры которых равны T_1 и T_2 , и катушки индуктивности L , соединённых последовательно (кольцом). Найти, какая энергия передаётся от одного сопротивления к другому за счёт флуктуаций тока в цепи.

Решение:

Будем определять энергию, передаваемую сопротивлению R_1 . Можно считать, что при каждом из сопротивлений есть шумовой источник ЭДС, $\mathcal{E}_{1,2}$. В цепи идет ток I . Средняя мощность, поставляемая сопротивлением R_1 в цепь, равна $w_{1-} = \langle \mathcal{E}_1 I \rangle$, получаемая из цепи $w_{1+} = R_1 \langle I^2 \rangle$, так что мощность, передаваемая первому сопротивлению $w_{2 \rightarrow 1} = w_{1+} - w_{1-}$. Импеданс цепи $Z(\omega) = R_1 + R_2 - i\omega L$. Компонента Фурье²⁸ тока выражается через компоненты Фурье случайных ЭДС: $I_\omega = (\mathcal{E}_{1\omega} + \mathcal{E}_{2\omega})/Z(\omega)$.

$$w_{1-} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \langle \mathcal{E}_{1\omega_1} I_{\omega_2} \rangle = \quad (355)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \langle (\mathcal{E}_{1\omega_1} (\mathcal{E}_{1\omega_2} + \mathcal{E}_{2\omega_2})) \rangle / Z(\omega_2). \quad (356)$$

Спектральные характеристики источников шума:

$$\langle \mathcal{E}_{1\omega_1} \mathcal{E}_{1\omega_2} \rangle = 2\pi \langle \mathcal{E}_1^2 \rangle_\omega \delta(\omega_1 + \omega_2), \langle \mathcal{E}_1^2 \rangle_\omega = 2R_1 T_1, \langle \mathcal{E}_2^2 \rangle_\omega = 2R_2 T_2,$$

$$\langle \mathcal{E}_{1\omega_1} \mathcal{E}_{2\omega_2} \rangle = 0. \text{ Подставив в (356), получаем}$$

$$w_{1-} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{2R_1 T_1}{Z(\omega)}. \quad (357)$$

Подобным же образом

$$w_{1+} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{2R_1(R_1 T_1 + R_2 T_2)}{Z(\omega)Z(-\omega)}, \quad (358)$$

²⁸ Мы используем разложение Фурье в виде ([1, § 122], [12, п. 12.2])

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} x_\omega e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}; \quad x_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} x(t) e^{i\omega t} dt.$$

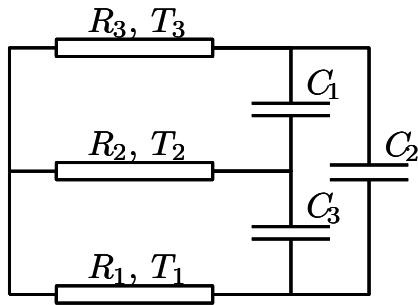


Рис. 34. Симметричный контур

так что

$$\begin{aligned} w_{2 \rightarrow 1} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{2R_1R_2(T_2 - T_1) + 2i\omega LR_1T_1}{Z(\omega)Z(-\omega)} = \\ &= 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{R_1R_2(T_2 - T_1) + i\omega LR_1T_1}{(R_1 + R_2)^2 + L^2\omega^2}. \end{aligned} \quad (359)$$

В итоге

$$w_{2 \rightarrow 1} = \frac{R_1R_2(T_2 - T_1)}{(R_1 + R_2)L}.$$

Нас не должна смущать расходимость интеграла (357) (сокращающаяся в ответе), хотя бы потому, что есть достаточно причин, ограничивающих белый шум ЭДС $\mathcal{E}_{1,2}$ при высоких частотах. Разумеется, перенос энергии, связанный всего с одной степенью свободы, очень мал.

Задача 134. Контур состоит из трёх одинаковых сопротивлений, $R_1 = R_2 = R_3 = R$, температуры которых различны, и трёх одинаковых конденсаторов $C_1 = C_2 = C_3 = C$ (рис. 34). Найти автокорреляционные функции зарядов на одном из конденсаторов и токов, идущих через конденсатор. Найти корреляционную функцию зарядов на конденсаторах C_1 и C_2 .

Задача 135. Найти корреляционную функцию $\langle \mathbf{R}(t)\mathbf{R}(0) \rangle$, где $\mathbf{R}(t)$ – расстояние между концами полимерной цепи в момент времени t . Эта величина (точнее, ее фурье-образ) связана с интенсивностью неупругого рассеяния света полимерной цепью.

Решение:

Уравнение Ланжевена для i -го звена полимерной цепи, учитывая быстрое затухание (т.е. можно пренебречь инерцией), принимает вид

$$\xi \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial t} = \frac{3T}{a^2} (\mathbf{x}_{i+1} + \mathbf{x}_{i-1} - 2\mathbf{x}_i) + \mathbf{f}_i(t) \quad (360)$$

где ξ – коэффициент трения, $\mathbf{f}_i(t)$ – флуктуационная сила, действующая на i -ое звено. Упругая сила между звеньями цепи $3T(x_{i+1} - x_i)/a^2$ найдена нами ранее, см. задачу 15. Удобно считать величину i непрерывной переменной, так что это уравнение можно переписать как

$$\xi \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial t} = k \frac{\partial^2 \mathbf{x}_i}{\partial i^2} + \mathbf{f}_i(t), \quad (361)$$

где введено обозначение $k = 3T/a^2$. В этом уравнении влияние среды, связанное с трением, мгновенно (нет запаздывания), поэтому естественно считать, что корреляционная функция случайной силы пропорциональна дельта-функции

$$\langle f_\alpha(t, i) f_\beta(t', j) \rangle = 2\xi T \delta(i - j) \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t') \quad (362)$$

Поскольку на концы цепи упругая сила действует только с одной стороны, граничные условия имеют вид

$$\left. \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial i} \right|_{i=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial i} \right|_{i=N} = 0,$$

Решение, согласующееся с этими граничными условиями, ищем в виде

$$\mathbf{x}(t, i) = \mathbf{y}_0(t) + \sum_{p=1}^{\infty} \mathbf{y}_p(t) \cos \frac{\pi p i}{N}. \quad (363)$$

Величина $\mathbf{y}_0(t)$ определяет движение центра масс цепи, поскольку

$$\mathbf{X}(t) = \frac{1}{N} \int_0^N \mathbf{x}(i, t) di = \mathbf{y}_0 \quad (364)$$

Из уравнения Ланжевена получаем

$$\xi \frac{\partial \mathbf{y}_0}{\partial t} = \frac{1}{N} \int_0^N \xi \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} di = \frac{1}{N} \int_0^N \left[k \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial i^2} + \mathbf{f}(i, t) \right] di = \frac{1}{N} \int_0^N \mathbf{f}(i, t) di, \quad (365)$$

так как $\frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial i} \Big|_{i=0,N} = 0$. Тогда

$$\mathbf{y}_0(t) - \mathbf{y}_0(0) = \frac{1}{N\xi} \int_0^t dt' \int_0^N \mathbf{f}(i, t') di. \quad (366)$$

Среднеквадратичное смещение центра масс за время t

$$\begin{aligned} \langle (\mathbf{y}_0(t) - \mathbf{y}_0(0))^2 \rangle &= \frac{1}{N^2 \xi^2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \int_0^N di \int_0^N dj \delta(i-j) \delta(t-t') 6\xi T = \\ &= \frac{6T}{N\xi} t \end{aligned} \quad (367)$$

позволяет найти коэффициент диффузии D_c полимерной цепи

$$D_c = \frac{T}{N\xi}, \quad (368)$$

который оказывается в N раз меньше коэффициента диффузии одного звена.

Компоненты

$$\mathbf{y}_p(t) = \frac{2}{N} \int_0^N di \mathbf{x}(t, i) \cos \frac{\pi p i}{N} \quad p = 1, 2, \dots$$

с $p > 0$ описывают внутренние движения в цепи. Используя уравнение Ланжевена, получим

$$\frac{\partial \mathbf{y}_p}{\partial t} = \frac{2}{N\xi} \int_0^N di \left[k \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial i^2} + \mathbf{f}(i, t) \right] \cos \frac{\pi p i}{N} = \frac{2}{N\xi} \mathbf{f}_p(t) - \frac{1}{\tau_p} \mathbf{y}_p(t), \quad (369)$$

где

$$\mathbf{f}_p(t) = \int_0^N \mathbf{f}(i, t) \cos \frac{\pi p i}{N} di, \quad \tau_p = \frac{N^2 \xi}{k \pi^2 p^2} \quad (370)$$

При интегрировании этого уравнения удобно начальное условие отнести к моменту времени $t' \rightarrow -\infty$ и выбрать его равным нулю, поскольку его

влияние из-за трения пренебрежимо мало. Тогда решением уравнения Ланжевена является

$$\mathbf{y}_p(t) = \frac{2}{N\xi} \int_{-\infty}^t \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_p}\right) \mathbf{f}_p(t') dt'. \quad (371)$$

Используя выражение для коррелятора случайной силы, находим

$$\langle f_p(t) \rangle = 0, \quad \langle f_{p\alpha}(t) f_{q\beta}(t') \rangle = TN\xi \delta_{pq} \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t') \quad (372)$$

Теперь можно вычислить коррелятор

$$\langle \mathbf{y}_p(t) \mathbf{y}_q(0) \rangle = \frac{12T\delta_{pq}}{N\xi} \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^0 dt'' e^{-(t-t'-t'')/\tau_p} \delta(t'-t'') = \frac{6T\tau_p \delta_{pq}}{N\xi} e^{-t/\tau_p} \quad (373)$$

Расстояние между концами цепи можно представить в виде

$$\mathbf{R}(t) = \mathbf{x}(t, N) - \mathbf{x}(t, 0) = \sum_{p=1,2,3,4\dots} [(-1)^p - 1] \mathbf{y}_p(t) = -2 \sum_{p=1,3,5\dots} \mathbf{y}_p(t). \quad (374)$$

Тогда, используя выражение для $\langle \mathbf{y}_p(t) \mathbf{y}_q(0) \rangle$, зависимость от времени коррелятора расстояния между концами цепи имеет вид

$$\langle \mathbf{R}(t) \mathbf{R}(0) \rangle = \frac{8Na^2}{\pi^2} \sum_{p=1,3,5\dots} \frac{1}{p^2} \exp\left(-\frac{tp^2}{\tau_1}\right). \quad (375)$$

Минимальное время релаксации, $\tau_1 = N^2 a^2 \xi / (3T\pi^2)$, определяет поведение коррелятора расстояния между концами цепи на больших временных масштабах.

При $t = 0$ воспроизводится хорошо известный результат $\langle \mathbf{R}^2 \rangle = Na^2$, поскольку

$$\sum_{p=1,3,5\dots} \frac{1}{p^2} = \sum_{p=1,2,3,4\dots} \frac{1}{p^2} - \sum_{p=2,4,6\dots} \frac{1}{p^2} = \sum_{p=1,3,5\dots} \frac{1}{p^2} \left(1 - \frac{1}{4}\right) = \frac{\pi^2}{8}, \quad (376)$$

где использовано

$$\sum_{p=1,2,3,4\dots} \frac{1}{p^2} = \zeta_2(1) = \int_0^\infty \frac{xdx}{e^x - 1} = \frac{\pi^2}{6}. \quad (377)$$

Задача 136. Частиц типа A совершают случайные блуждания и захватываются случайно распределенными неподвижными ловушками,

частицами типа B . Концентрация ловушек (частиц типа B) гораздо больше концентрации частиц типа A , $n_B \gg n_A$. Оценить зависимость концентрации частиц типа A от времени.

Решение:

За счет случайности распределения ловушек возможно, что в некотором объеме V ловушки отсутствуют и в этой полости частицы типа А будут находиться достаточно большое время, а уменьшение их числа будет обусловлено диффузией из этого не содержащего ловушек объема.

Вероятность, что в объеме V не содержатся частицы типа B , плотность которых можно считать постоянной, определяется распределением Пуассона

$$P(0, V) = e^{-n_0 V}. \quad (378)$$

Рассматривая для простоты шарообразную полость радиуса R , мы ищем решение уравнения диффузии для частиц типа A

$$\frac{\partial n_A(r, t)}{\partial t} = D \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial n_A(r, t)}{\partial r} \right) \quad (379)$$

с граничными условиями $n_A(r = R) = 0$ в виде

$$n_A(r, t) = \sum_{l=1}^{\infty} A_l e^{-\lambda_l t} \frac{\sin(\pi l r / R)}{r} \quad (380)$$

получая

$$\lambda_l = \frac{D\pi^2 l^2}{R^2} \quad (381)$$

Таким образом наиболее медленно убывает решение с $l = 1$. Учитывая всевозможные размеры полостей, получим

$$n_A(t) \sim n_A(0) \int R^2 dR e^{-D\pi^2 t / R^2 - n_0 4\pi R^3 / 3} \quad (382)$$

Оценивая этот интеграл методом Лапласа (основной вклад в интеграл дает область вблизи минимума показателя экспоненты), получим

$$n_A(t) \sim e^{-\alpha n_0^{2/5} (Dt)^{3/5}}, \quad (383)$$

где α – численный коэффициент ~ 1 .

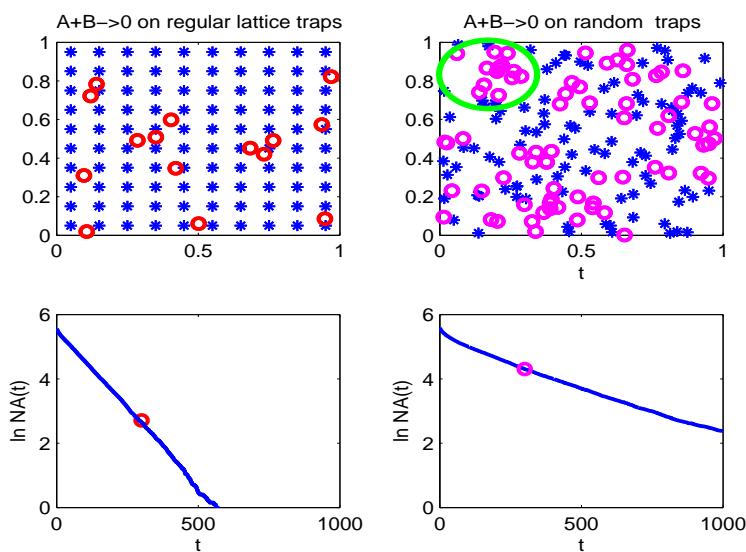


Рис. 35. Сравнение скоростей захвата частиц типа A (0, 0) неподвижными ловушками (*) при их регулярном (слева) и хаотическом расположении (справа). Верхние рисунки представляют конфигурации частиц в определенный момент времени. На нижних рисунках (сплошные кривые) приведена зависимость концентрации частиц от времени, усредненная по многим реализациям, а концентрации частиц, соответствующие верхним рисункам, отмечены кружками (0, 0). Большим кругом (0) отмечена типичная область, свободная от ловушек, в которой долго “живут” подвижные частицы

Для микроскопически однородного распределения ловушек убывание средней концентрации \bar{n} частиц типа А определяется уравнением

$$\frac{d\bar{n}_A(t)}{dt} = -\lambda n_B \bar{n}_A(t) \quad (384)$$

Откуда

$$\bar{n}_A(t) = n_A(0)e^{-\lambda n_0 t} \quad (385)$$

Таким образом, флуктуации в распределении частиц типа B приводят к более медленному уменьшению числа частиц типа A, рис.15..

Задача 137. Имеется источник моноэнергетических нейтронов, выпускающий изотропно постоянное число нейтронов в единицу време-

ни, Нейтроны замедляются в среде в результате упругого рассеяния на неподвижных ядрах массой $A \gg 1$. Считая сечение рассеяния независящим от энергии нейтрона, оценить пространственное распределение нейронов в зависимости от их энергии.

Решение:

При рассеянии легкой частицы массой m (нейтрона), движущейся со скоростью v , на неподвижной частице массой $M \approx Am$, переданный импульс меняется от нулевого до максимального $\Delta P \approx 2mv$, так что теряемая энергия $\Delta\varepsilon \approx (\Delta P)^2/2M \sim (m/M)\varepsilon$. Тогда для того, чтобы замедлиться от энергии ε_0 до ε нейтрону потребуется испытать число соударений N , определяемое из соотношения $(1 - m/M)^N \sim \varepsilon/\varepsilon_0$, т.е. $N \sim (M/m) \ln(\varepsilon_0/\varepsilon)$.

Если длина свободного пробега равна λ , то вероятность $P(r)$ оказаться на расстоянии r за N шагов длиной λ в результате случайного блуждания пропорциональна

$$P(r) \sim \exp\left(-\frac{3r^2}{2N\lambda^2}\right) = \exp\left(-\frac{3r^2}{2\lambda^2(M/m) \ln(\varepsilon_0/\varepsilon)}\right)$$

Эта же величина определяет и распределение числа нейтронов.

Из этого выражения следует, что вероятность найти нейтрон с энергией ε заметно отлична от нуля на расстояниях, не превышающих

$$r_\varepsilon \sim \lambda \sqrt{\frac{M}{m} \ln(\varepsilon_0/\varepsilon)}. \quad (386)$$

Естественно, что гауссово распределение устанавливается на расстоянии от источника $r > \lambda$. Однако, оно нарушается и на достаточно больших расстояниях, так как там доминируют нейтроны, пролетевшие расстояние r без столкновений, поскольку вероятность этого пропорциональна $\exp(-r/\lambda)$ и спадает гораздо медленнее гауссового распределения. Приравнивая показатели экспонент для этих двух распределений, получаем оценку максимального расстояния от источника, где еще применимо диффузионное приближение

$$r_{max} \sim \lambda \frac{M}{m} \ln(\varepsilon_0/\varepsilon). \quad (387)$$

Отметим, что $r_{max} \gg r_\varepsilon$ для $M \gg m$, $\varepsilon_0 \gg \varepsilon$

Задача 138. Выразить коэффициенты A и B в уравнении диффузии

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(Af(x, t)) + \frac{\partial^2}{\partial x^2}(Bf(x, t)),$$

для случайных блужданий, изучавшихся в практикуме „Моделирование физических процессов“ (полагая $\Delta t = 1$ и $\langle \Delta x \rangle = -b$).

В этой работе смещение частицы за шаг Δt задавалось как $\Delta x = h * (2r - 1) - b$, где r — случайное число с равномерным распределением от 0 до 1, $h =, b =, b \ll h$.

Решение:

$$A = -b, \quad B = \frac{1}{3}h^2.$$

Задача 139. Выразить коэффициенты A и B в уравнении диффузии для броуновских частиц в пространстве скоростей. Получить стационарное распределение по скоростям.

Решение:

В пространстве скоростей уравнение диффузии

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}(f \mathbf{A}) - \left(\frac{\partial^2}{\partial v_x^2} + \frac{\partial^2}{\partial v_y^2} + \frac{\partial^2}{\partial v_z^2} \right)(Bf),$$

где

$$\mathbf{A} = -\frac{\langle \Delta \mathbf{v} \rangle}{\Delta t} = -\frac{\mathbf{v}}{\tau}, \quad B = \frac{\langle (\Delta v_x)^2 \rangle}{2\Delta t} = \frac{T}{m\tau}.$$

Для функции распределения, не зависящей от времени, уравнение диффузии сводится к условию $\mathbf{j} = 0$, где

$$\mathbf{j} = \mathbf{A}f - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}(Bf).$$

Учитывая, что в стационарном режиме функция распределения изотропна, получаем уравнение

$$\frac{vf}{\tau} + \frac{d}{dv} \left(\frac{T}{m\tau} f \right) = 0,$$

которое приводит к распределению

$$f(v) \propto \exp \left(-\frac{mv^2}{2T} \right),$$

(как и следовало ожидать).

Задача 140. Броуновские частицы движутся в поле тяжести. Ось x направлена вверх. Пусть при $x = 0$ установлена непроницаемая стена („пол“), а величины A и B — постоянные. Найти установившееся распределение $f(x)$ (для $x > 0$). Найти, в частности, распределение броуновских частиц по высоте над дном сосуда в поле тяжести.

Решение:

Для установившегося распределения выполняется условие $j_x = 0$. Оно сводится к равенству $Af + \frac{d}{dx}(Bf) = 0$ и дает $f \propto \exp(-Ax/B)$ (с учетом того, что $f \rightarrow 0$ при $x \rightarrow +\infty$.) Уравнение движения частицы в поле тяжести $m\dot{\mathbf{v}} = -\alpha\mathbf{v} + \mathbf{f}_{\text{случ}} + m\mathbf{g}$ (величина ускорения в поле тяжести g должна быть „подправлена“ так, чтобы учитывалась архимедова сила). Влияние поля тяжести сводится к появлению „дрейфовой“ скорости $\mathbf{v}_{\text{др}} = m\mathbf{g}/\alpha$. Следует выбрать интервал времени $\Delta t \gg \tau$, так что $\langle(\Delta x)^2\rangle =$

$= (2T\tau/m)\Delta t$, отсюда $B = T\tau/m$. Средняя же скорость $\mathbf{A} = \mathbf{v}_{\text{др}} = \mathbf{g}\tau$ обусловлена только смещением в поле тяжести.

В итоге $f(x) = f(0) \exp(-mgx/T)$.

В слое толщины $\sim A\Delta t$ вблизи дна на формирование величин A, B должны оказывать влияние столкновения броуновских частиц с дном. Движение и концентрация частиц в этом слое будут несколько разными в зависимости от того, например, являются ли эти столкновения упругими или неупругими. В последнем случае, очевидно, концентрация частиц в тонком слое вблизи дна окажется „аномально“ повышенной.

Задача 141. Для газа с переменной в пространстве температурой $A = 0$, $B(x) = b + ax^2$. Найти установившееся со временем распределение плотности.

Задача 142. В газе частиц массой m находится небольшая примесь газа частиц массой $M \gg m$. Газы находятся в равновесии при температуре T , концентрация легкого газа n , сечение рассеяния легких и тяжелых частиц σ . Оценить коэффициент диффузии по импульсам тяжелых частиц.

Решение:

Изменение импульса ΔP тяжелой частицы равно изменению импульса легкой частицы $\Delta p \sim p \sim \sqrt{Tm}$. Тогда

$$D_P \sim \langle \Delta P^2 \rangle \nu \sim \frac{\langle p^2 \rangle v}{\lambda} \sim \frac{\sqrt{m T^3}}{\lambda},$$

где $\nu \sim v/\lambda$ – число столкновений тяжелой частицы с легкими в единицу времени (v – относительная скорость, приближенно равная характерной скорости легких частиц), $\lambda = 1/(n\sigma)$.

Задача 143. В газе частиц массой m находится небольшая примесь газа частиц массой $M \gg m$. Газы находятся в равновесии при температуре T , концентрация легкого газа n , сечение рассеяния легких и тяже-

лых частиц σ . Оценить коэффициент диффузии по энергии тяжелых частиц.

Решение:

Изменение импульса ΔP тяжелой частицы равно изменению импульса легкой частицы $\Delta p \sim p \sim \sqrt{Tm}$. Характерное изменение энергии тяжелой частицы при одном столкновении $\Delta E \sim P\Delta P/M \sim T\sqrt{m/M}$, поскольку $\Delta P \sim \sqrt{mT} \ll P \sim \sqrt{MT}$. Тогда

$$D_E \sim \langle \Delta E^2 \rangle \nu \sim \frac{mT^2 v}{M\lambda} \sim \frac{\sqrt{mT^5}}{M\lambda},$$

где $\nu \sim v/\lambda$ – число столкновений тяжелой частицы с легкими в единицу времени (v – относительная скорость, приближенно равная характерной скорости легких частиц), $\lambda = 1/(n\sigma)$.

Задача 144. В газе частиц массой m находится небольшая примесь газа частиц массой $M \gg m$. Газы находятся в равновесии при температуре T , концентрация легкого газа n , сечение рассеяния легких и тяжелых частиц σ . Найти (по порядку величины) связь коэффициентов диффузии в координатном и импульсном пространствах тяжелых частиц.

Решение:

Изменение импульса ΔP тяжелой частицы равно изменению импульса легкой частицы $\Delta p \sim p \sim \sqrt{Tm}$. Тогда

$$D_P \sim \langle \Delta P^2 \rangle \nu \sim \frac{\langle p^2 \rangle v}{\lambda} \sim \frac{\sqrt{mT^3}}{\lambda},$$

где $\nu \sim v/\lambda$ – число столкновений тяжелой частицы с легкими в единицу времени (v – относительная скорость, приближенно равная характерной скорости легких частиц), $\lambda = 1/(n\sigma)$. Коэффициент диффузии в координатном пространстве $\kappa \sim \lambda v$, так что

$$\kappa D_P \sim Tmv^2 \sim T^2.$$

Задача 145. Фотоны с энергией $\varepsilon = \hbar\omega$ рассеиваются на электроном газе с температурой T . Оценить коэффициент диффузии фотонов по энергии в случае $\hbar\omega \ll T \ll mc^2$. Длина свободного пробега фотона λ .

Решение:

При рассеянии изменение энергии фотона $\Delta\varepsilon$ равно изменению энергии электрона ΔE . Изменение импульса электрона $\Delta P \sim \hbar\omega/c$. Тогда

$$\Delta\varepsilon = \Delta E \sim \frac{P^2 - (P - \Delta P)^2}{m} \sim \frac{P\hbar\omega}{mc},$$

поскольку характерное изменение импульса электрона при рассеянии фотона $\Delta P \sim \hbar\omega/c \ll \sqrt{mT}$ – характерного значения импульса электрона до рассеяния, по условию задачи. Коэффициент диффузии по энергии фотона оцениваем как

$$D_\varepsilon \sim \langle \Delta\varepsilon^2 \rangle \nu \sim \frac{mT(\hbar\omega)^2 c}{(mc)^2 \lambda} \sim \frac{T(\hbar\omega)^2}{mc\lambda},$$

где $\nu \sim c/\lambda$ – число столкновений фотона с электронами в единицу времени.

Задача 146. Фотоны с энергией $\hbar\omega$ рассеиваются на электроном газе с температурой $T \ll mc^2$. Оценить коэффициент диффузии фотонов по энергии в случае $\sqrt{mc^2 T} \ll \hbar\omega \ll mc^2$. Длина свободного пробега фотона λ .

Решение:

При рассеянии изменение энергии фотона $\Delta\varepsilon$ равно изменению энергии электрона ΔE . Изменение импульса электрона $\Delta P \sim \hbar\omega/c$. Тогда

$$\Delta\varepsilon = \Delta E \sim \frac{\Delta P^2}{m} \sim \frac{(\hbar\omega)^2}{mc^2},$$

поскольку характерное изменение импульса электрона при рассеянии фотона $\Delta P \sim \hbar\omega/c \gg \sqrt{mT}$ – характерного значения импульса электрона до рассеяния, по условию задачи. В то же время $\Delta\varepsilon/\hbar\omega \sim \hbar\omega/mc^2 \ll 1$, так что изменение энергии фотона носит диффузионный характер. Коэффициент диффузии по энергии фотона оцениваем как

$$D_\varepsilon \sim \langle \Delta\varepsilon^2 \rangle \nu \sim \frac{(\hbar\omega)^4 c}{(mc^2)^2 \lambda} \sim \frac{(\hbar\omega)^4}{m^2 c^3 \lambda},$$

где $\nu \sim c/\lambda$ – число столкновений фотона с электронами в единицу времени.

Задача 147. Фотоны рассеиваются на электроном газе с температурой T . Энергия фотонов $\varepsilon \ll T \ll mc^2$. Длина свободного пробега фотона λ . Найти зависимость полной энергии фотонов от времени.

Решение:

Полная энергия фотонов равна

$$E = \int \varepsilon f(\varepsilon) \rho(\varepsilon) d\varepsilon,$$

где $f(\varepsilon)$ – функция распределения фотонов по энергии, $\rho(\varepsilon) \sim \varepsilon^2$ – плотность состояний. Изменение функции распределения описывается уравнением Фоккера-Планка

$$\frac{\partial f\rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[D_\varepsilon \rho \left(\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} + \frac{f}{T} \right) \right],$$

где $D_\varepsilon = T\varepsilon^2/(2mc\lambda) \equiv C\varepsilon^2$ – коэффициент диффузии фотонов по энергии. Для $\varepsilon \ll T$ можно пренебречь членом f/T . Тогда

$$\frac{dE}{dt} = \int \varepsilon C \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\varepsilon^4 \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon = 4CE,$$

где дважды проинтегрировали по частям. Таким образом

$$E(t) = E(0)e^{2Tt/(mc\lambda)}.$$

Задача 148. Эволюция плотности частиц примеси $n(z, t)$ в турбулентном (хаотическом) потоке вблизи непроницаемой стенки описывается уравнением

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[(\kappa + \mu z^4) \frac{\partial n}{\partial z} \right],$$

где κ – коэффициент молекулярной диффузии частиц примеси, а член μz^4 описывает адвективную диффузию частиц примеси – хаотические смещения частиц в случайном потоке. Оценить скорость убывания плотности частиц примеси на больших временах, если в начальный момент времени они находились вблизи стенки.

Решение:

Оператор в правой части уравнения имеет дискретный спектр для граничных условий задачи $dn/dz|_{z=0} = 0$, $n|_{z \rightarrow \infty} \rightarrow 0$ и решение этого уравнения можно представить в виде

$$n(z, t) = \sum_i e^{-\lambda_i t} f_i(z).$$

На больших временах основной вклад дает минимальное значение λ_{min} , которое можно оценить с помощью вариационного подхода. Для этого ищем решение $n(z, t) = \exp(-\lambda_{tr}t)f_{tr}(z)$ с некоторой пробной функцией $f_{tr}(z)$, удовлетворяющей граничным условиям задачи $df_{tr}/dz|_{z=0} = 0$, $f_{tr}|_{z \rightarrow \infty} \rightarrow 0$, что дает

$$-\lambda_{tr}f_{tr}(z) = \frac{\partial}{\partial z} \left[(\kappa + \mu z^4) \frac{\partial f_{tr}}{\partial z} \right].$$

Умножаем это уравнение на f_{tr} и интегрируем правую часть по частям с учетом граничных условий, получая

$$\lambda_{tr} = \frac{\int_0^\infty (\kappa + \mu z^4) (df_{tr}/dz)^2 dz}{\int_0^\infty (f_{tr})^2 dz}.$$

Минимизируя это выражение для различных пробных функций можно получить оценку значения величины λ_{min} , которая и определяет плотность числа частиц на больших временах. Для минимизации этого выражения пробная функция должна выбираться, в силу граничных условий задачи, с минимальным значением производной для малых z ($z \ll r_l = (\kappa/\mu)^{1/4}$) и достаточно быстро стремящейся к нулю при больших z . В качестве иллюстрации вариационного метода рассмотрим пробную функцию вида $f_{tr} = \exp(-\alpha z^2/2)$, удовлетворяющую граничным условиям задачи с одним подгоночным параметром α . Тогда имеем

$$\lambda_{tr} = \frac{\int_0^\infty (\kappa + \mu z^4) \alpha^2 z^2 \exp(-\alpha z^2) dz}{\int_0^\infty \exp(-\alpha z^2) dz}.$$

Вычисляя гауссовые интегралы, получим

$$\lambda_{tr} = \frac{1}{2} \left(\kappa \alpha + \frac{15\mu}{4\alpha} \right).$$

Минимизируя это выражение по подгоночному параметру α получим оценку $\lambda_{min} \approx 1.93\sqrt{\kappa\mu}$. Таким образом

$$n(z, t) \sim \exp(-1.93\sqrt{\kappa\mu}t).$$

Если бы не было адвекции (жидкость покоялась), то убывание концентрации частиц вблизи стенки носило степенной характер

$$n_0(z, t) \sim t^{-1/2}.$$

Задача 149. Найти среднеквадратичное смещение $\langle r^2 \rangle$ частицы за время t . Уравнение движения имеет вид

$$\frac{dv}{dt} = \xi(t),$$

где v – скорость частицы, ξ – случайная сила с корреляторами $\langle \xi(t') \rangle = 0$, $\langle \xi(t') \xi(t'') \rangle = D\delta(t' - t'')$. Начальные условия: $v(0) = 0$, $r(0) = 0$.

Решение:

Интегрируя уравнение движения с учетом начальных условий получим

$$v(t) = \int_0^t \xi(t') dt', \quad r(t) = \int_0^t v(t_1) dt_1.$$

Корреляционная функция скоростей равна

$$\langle v(t_1)v(t_2) \rangle = \int_0^{t_1} dt' \int_0^{t_2} dt'' \langle \xi(t')\xi(t'') \rangle = D \min(t_1, t_2).$$

Тогда

$$\langle r^2(t) \rangle = \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 D \min(t_1, t_2) = 2D \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} t_2 dt_2 = \frac{Dt^3}{3}.$$

Задача 150. Уравнение движения частицы имеет вид

$$\frac{dv}{dt} = \xi(t),$$

где v – скорость частицы, ξ – случайная сила с корреляторами $\langle \xi(t') \rangle = 0$, $\langle \xi(t')\xi(t'') \rangle = D\delta(t'-t'')$. Найти корреляционную функцию $\langle v(t)r(t) \rangle$. Начальные условия: $v(0) = 0$, $r(0) = 0$.

Решение:

Интегрируя уравнение движения с учетом начальных условий получим

$$v(t) = \int_0^t \xi(t') dt', \quad r(t) = \int_0^t v(t_1) dt_1.$$

Корреляционная функция скоростей равна

$$\langle v(t_1)v(t_2) \rangle = \int_0^{t_1} dt' \int_0^{t_2} dt'' \langle \xi(t')\xi(t'') \rangle = D \min(t_1, t_2).$$

Тогда

$$\langle r(t)v(t) \rangle = \int_0^t dt_1 D \min(t_1, t) = \frac{Dt^2}{2}.$$

16. Уравнение Больцмана

Задача 151. На ускорителях со встречными пучками сгустки частиц фокусируются в *точке встречи* (см. рис. 36). Примем, что при $z = 0$

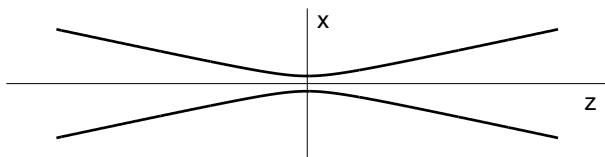


Рис. 36. Вид пучка частиц вблизи фокуса

распределения частиц каждого из пучков по поперечным координатам x, y и по углам отклонения θ_x, θ_y скорости от оси z гауссовые:

$$f(x, y, \theta_x, \theta_y) = \frac{N}{(2\pi)^2 \sigma_x \sigma_y \Delta_x \Delta_y} \exp \left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{\theta_x^2}{2\Delta_x^2} - \frac{\theta_y^2}{2\Delta_y^2} \right),$$

где N — число частиц на единицу длины пучка. Будем считать пучки неограниченными и однородными в направлении оси z . Можно принять также, что скорость частиц равна c , а существенные в задаче углы θ_x, θ_y малы, так что $v_z \approx \pm c$.

Найти функцию распределения при $z \neq 0$, концентрацию частиц пучка $n(x, y, z)$. Найти число соударений частиц встречных пучков на участке dz за время dt , если сечение соударения равно σ_{int} . (Это сечение достаточно мало, чтобы не влиять на концентрацию частиц в пучках.) Взаимодействием частиц в пучках друг с другом можно пренебречь.

Решение:

Зависимость от времени функции распределения при свободном движении частиц:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = F(\mathbf{r} - \mathbf{v}t, \mathbf{v}) = F_1(x - c\theta_x t, y -$$

$-c\theta_y t, z - ct, \theta_x, \theta_y) \dots$, F_1 зависит от своих аргументов x, y, z через линейные комбинации

$$x - c\theta_x t - \theta_x(z - ct) = x - \theta_x z, \quad y - c\theta_y t - \theta_y(z - ct) = y - \theta_y z.$$

Формальное обоснование этого физического аргумента может быть получено решением стационарного уравнения Больцмана

$$\mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = 0 \rightarrow \frac{\partial f}{\partial z} + \theta_x \frac{\partial f}{\partial x} + \theta_y \frac{\partial f}{\partial y} = 0$$

методом характеристик:

$$\frac{dz}{1} = \frac{dx}{\theta_x} = \frac{dy}{\theta_y},$$

откуда $x - \theta_x z = C_1$, $y - \theta_y z = C_2$. Учитывая вид функции распределения при $z = 0$, получаем

$$f(x, y, z, \theta_x, \theta_y) = \\ = \frac{N}{(2\pi)^2 \sigma_x \sigma_y \Delta_x \Delta_y} \exp \left(-\frac{(x - \theta_x z)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(y - \theta_y z)^2}{2\sigma_y^2} - \frac{\theta_x^2}{2\Delta_x^2} - \frac{\theta_y^2}{2\Delta_y^2} \right).$$

Концентрация частиц в пучке

$$n(x, y, z) = \int f d\theta_x d\theta_y = \frac{N}{2\pi \tilde{\sigma}_x \tilde{\sigma}_y} \exp \left(-\frac{x^2}{2\tilde{\sigma}_x^2} - \frac{y^2}{2\tilde{\sigma}_y^2} \right),$$

где

$$\tilde{\sigma}_x^2 = \sigma_x^2(1 + z^2/\beta_x^2), \quad \tilde{\sigma}_y^2 = \sigma_y^2(1 + z^2/\beta_y^2), \quad \beta_x = \sigma_x/\Delta_x, \quad \beta_y = \sigma_y/\Delta_y.$$

Число соударений в секунду на участке dz

$$d\nu = \sigma_{int} \cdot 2c \cdot dz \int n^2(x, y, z) dx dy = \frac{c N^2}{2\pi \tilde{\sigma}_x \tilde{\sigma}_y} \sigma_{int} dz.$$

Разумеется, найденные распределения справедливы только на участке между фокусирующими пучками линзами, а сгустки частиц не бесконечны²⁹.

Задача 152. Найти диэлектрическую проницаемость плазмы в слу-
чаях, когда электрическое поле \mathbf{E} параллельно волновому вектору \mathbf{k} и
когда $\mathbf{E} \perp \mathbf{k}$ ($\varepsilon_l(\omega, \mathbf{k})$ и $\varepsilon_t(\omega, \mathbf{k})$) при условии $k\langle v \rangle \ll \omega$.

Решение:

Пусть плазма находится в электрическом поле $\mathbf{E} \propto e^{i\mathbf{kr}-i\omega t}$. Мы при-
нимаем, что электрическое поле достаточно слабое, чтобы отклонение
функции распределения электронов δf от равновесной f_0 можно было
считать малым и произвести линеаризацию кинетического уравне-
ния. Мы найдём добавку к функции распределения электронов, затем

²⁹ Для ускорителя ВЭПП-4М, например, $\sigma_x = 1$ мм, $\sigma_y = 0,03$ мм, $\beta_x = 75$ см,
 $\beta_y = 5$ см, длина сгустков частиц $\sigma_z = 5$ см, фокусные расстояния линз порядка
нескольких метров. $N = (N_0/\sqrt{\pi}\sigma_z) \exp(-(z \pm ct)^2/2\sigma_z^2)$.

— плотность тока $\mathbf{j} = e \int \mathbf{v} \delta f d^3 p$, выразим проводимость и, наконец, воспользуемся соотношением

$$\varepsilon = 1 + \frac{4\pi\sigma i}{\omega}. \quad (388)$$

Выберем ось x параллельно направлению вектора \mathbf{k} . С учетом того, что $\delta f \propto \mathbf{E}$, из линеаризованного кинетического уравнения (без учета столкновений)

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + v_x \frac{\partial \delta f}{\partial x} + e\mathbf{E} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = 0$$

получаем

$$\delta f = -\frac{ie\mathbf{E}}{\omega - kv_x} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}}.$$

Будем также использовать разложение

$$\frac{1}{\omega - kv_x} = \frac{1}{\omega} \left(1 + \frac{kv_x}{\omega} + \left(\frac{kv_x}{\omega} \right)^2 + \dots \right).$$

Начнём со случая, когда электрическое поле параллельно \mathbf{k} .

$$\begin{aligned} j \equiv j_x &= \frac{-ie^2 E}{\omega} \int v_x \frac{\partial f_0}{\partial p_x} \left(1 + \frac{kv_x}{\omega} + \left(\frac{kv_x}{\omega} \right)^2 + \dots \right) d^3 p = \\ &= \frac{ine^2}{m} \left(1 + \frac{k^2 \langle v^2 \rangle}{\omega^2} \right) E = \sigma_l E, \\ \varepsilon_l &= 1 - \frac{\omega_0^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{k^2 \langle v^2 \rangle}{\omega^2} \right), \quad \omega_0^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}. \end{aligned}$$

Для распределения Максвелла $\langle v^2 \rangle = 3T/m$.

Для случая $\mathbf{E} \perp \mathbf{k}$ направим ось y вдоль \mathbf{E} . Тогда

$$\begin{aligned} j \equiv j_y &= -ie^2 E \int v_y \frac{\partial f_0}{\partial p_y} \frac{d^3 p}{\omega - kv_x} = \frac{ieE}{m} \int \frac{f_0 d^3 p}{\omega - kv_x} = \sigma_t E, \quad (389) \\ \varepsilon_t &= 1 - \frac{\omega_0^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{k^2 \langle v^2 \rangle}{3\omega^2} \right). \end{aligned}$$

Мы не выписываем здесь мнимую часть ε , обусловленную затуханием Ландау.

Приведем еще один вариант вывода ε_l и ε_t , на этот раз — не связанный с использованием кинетического уравнения.

Сначала напомним, как находится диэлектрическая проницаемость плазмы без учета теплового движения электронов. Дипольный момент, возникающий при смещении электрона в электрическом поле $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E} \exp(-i\omega t)$, равен $\mathbf{p}(t) = \alpha(\omega)\mathbf{E}(t)$, где $\alpha = -e^2/m\omega^2$ — поляризуемость частицы. Поляризация вещества $\mathbf{P} = n\mathbf{p}$, где n — концентрация электронов. Далее, $\mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$, откуда

$$\varepsilon(\omega) = 1 + 4\pi n \alpha(\omega). \quad (390)$$

Чтобы учесть тепловое движение электронов рассматриваем по отдельности группы электронов с одинаковыми скоростями \mathbf{v} . Количество электронов в каждой из таких групп определяется функцией распределения $f(\mathbf{v})$. Найдем переменный дипольный момент электрона, движущегося по закону $\mathbf{r} = \mathbf{v}t$, возникающий в поле $\mathbf{E} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)$. По сути дела, мы будем определять реакцию электрона на поле электромагнитной волны, поэтому считаем, что наряду с электрическим есть и магнитное поле, зависимость которого от координат и времени такова же. Магнитное поле можно определить из уравнения $\text{rot } \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$, что дает $\mathbf{B} = \frac{c}{\omega} [\mathbf{k}\mathbf{E}]$. Пока мы рассматривали покоявшиеся (без учета волны) электроны, это магнитное поле нас не интересовало, поскольку учет его влияния на движение электрона дал бы поправку, квадратичную по амплитуде поля. Для учета колебаний электрона в системе отсчета, движущейся со скоростью \mathbf{v} , это магнитное поле становится существенным. Дело в том, что электрическое поле в этой системе отсчета определяется как электрическим, так и магнитным полями в лабораторной системе:

$$\mathbf{E}' = \mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v}\mathbf{B}] = \mathbf{E} + \frac{1}{\omega} [\mathbf{v}[\mathbf{k}\mathbf{E}]] = \mathbf{E} + \frac{1}{\omega} (\mathbf{v}\mathbf{E})\mathbf{k} - \frac{1}{\omega} (\mathbf{k}\mathbf{v})\mathbf{E}, \quad (391)$$

$$\mathbf{E}'(t) = \mathbf{E}' \exp(-i(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})t).$$

Поляризуемость α должна быть взята при значении частоты, равном $\omega' = \omega - \mathbf{k}\mathbf{v}$. (Изменение частоты поля представляет собой эффект Доплера.) Возвращаясь в лабораторную систему, получаем дипольный момент $\mathbf{p} = \mathbf{p}'$, где $\mathbf{p}' = \alpha(\omega')\mathbf{E}'$.³⁰ Поляризацию получаем, просуммировав значения \mathbf{p} по всем электронам, учитывая при этом разброс их

³⁰ Кроме того возникает также и магнитный момент, $\mathbf{m} = \frac{1}{c} [\mathbf{v}\mathbf{p}']$. При возврате в лабораторную систему вклад его в электрический дипольный момент будет иметь относительную величину $\sim v^2/c^2$, и мы не будем его учитывать.

скоростей, иначе говоря, усреднив с максвелловской функцией распределения.

Рассмотрим сначала случай, когда $\mathbf{E} \parallel \mathbf{k}$. В этом случае $\mathbf{E}' = \mathbf{E}$ и в (390) заменяем $n\alpha$ на

$$n\langle\alpha(\omega')\rangle = \int \alpha(\omega - kv_x)f(v)d^3v = -\frac{e^2}{m} \int \frac{f(v)d^3v}{(\omega - kv_x)^2}. \quad (392)$$

Проинтегрировав по частям по v_x , получаем

$$n\langle\alpha(\omega')\rangle = -\frac{e^2}{mk} \int \frac{\partial f}{\partial v_x} \frac{d^3v}{\omega - kv_x}. \quad (393)$$

Это приводит к найденному уже выше выражению ε_l .

В случае $\mathbf{E} \perp \mathbf{k}$ из (391) получаем $\mathbf{E}' = \mathbf{E}\frac{\omega'}{\omega} + \frac{Ev_y}{\omega}\mathbf{k}$. Второе слагаемое при усреднении по направлениям исчезнет, так что в (390) заменяем $n\alpha$ на

$$n\left\langle\alpha(\omega')\frac{\omega'}{\omega}\right\rangle = -\frac{e^2}{m} \int \frac{f(v)d^3v}{\omega - kv_x}. \quad (394)$$

В результате для ε_t также получаем значение, найденное выше.

Задача 153. Найти статическую (продольную) диэлектрическую проницаемость плазмы (т. е. $\varepsilon(\omega, k)$ при условии $\omega = 0$).

Решение:
 $\varepsilon(\mathbf{k}) = 1 + \frac{\chi^2}{k^2}, \quad \chi^2 = \frac{4\pi ne^2}{T}$.

(При переходе к пределу $\omega \rightarrow 0$ следует заменять $\omega \rightarrow i\epsilon \rightarrow 0$. Поэтому в (392) при интегрировании по v_x получится полюс второго порядка при $v_x = 0$, который при интегрировании в комплексной плоскости обходится снизу. Удобнее воспользоваться выражением (393).)

Поскольку в ответ не входит масса частиц, протоны дают такой же вклад, как и электроны, т. е. n — суммарная концентрация заряженных частиц.

Задача 154. Найти поправку к диэлектрической проницаемости плазмы, обусловленную движением ионов.

Решение:
Ограничимся случаем, когда можно пренебречь разбросом скоростей частиц³¹. $\varepsilon(\omega) = 1 - \omega_e^2/\omega^2 - \omega_i^2/\omega^2, \quad \omega_a^2 = 4\pi n_a e_a^2/m_a, \quad a = e, i$. Для $n_e = n_i$ дело сводится к замене массы электрона на приведенную массу электрона и иона.

³¹ В этом случае кинетическое уравнение, в сущности, не нужно.

Обратим внимание на сходство плазменных колебаний в этом случае с оптическими колебаниями кристаллической решетки.

Задача 155. При определённых условиях в плазме возможны колебания, в которых электроны и ионы движутся с почти одинаковыми амплитудами, так что электрическое поле, возникающее при смещении ионов, в очень большой мере экранируется электронами. Поэтому частота этих колебаний мала, $\omega \ll kv_e$. В то же время их фазовая скорость велика по сравнению со скоростью ионов³²: $v_i \ll \omega/k$. Такие колебания называют ионным звуком.

Найти закон дисперсии ионного звука.

Решение:

Можно считать, что в указанных условиях поляризация электронной составляющей плазмы оказывается статической:

$\varepsilon_e - 1 = \chi^2/k^2$, $\chi^2 = 4\pi ne^2/T_e$, а в ионной поляризации можно пренебречь пространственной дисперсией:
 $\varepsilon_i - 1 = -\omega_{0i}^2/\omega^2$, $\omega_{0i}^2 = 4\pi ne^2/m_i$. В итоге

$$\varepsilon = 1 + \frac{\chi^2}{k^2} - \frac{\omega_{0i}^2}{\omega^2}.$$

Закон дисперсии ионного звука получаем из уравнения $\varepsilon(\omega, k) = 0$. При низких частотах скорость такого звука $\omega/k = \sqrt{T_e/m_i}$. Указанные в условии соотношения скоростей могут выполняться, если $T_e \gg T_i$.

Такие колебания сходны с акустическими колебаниями кристаллической решетки.

Задача 156. Провести в интегrale столкновений

$$I = \int w \cdot [f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1, t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t)f(\mathbf{r}, \mathbf{p}'_1, t)]d^3p_1 d^3p' d^3p'_1,$$

где

$$w = w(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}', \mathbf{p}'_1) = w(\mathbf{p}', \mathbf{p}'_1 \rightarrow \mathbf{p}, \mathbf{p}_1) \propto$$

$$\propto \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) \delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}' - \mathbf{p}'_1) \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) + \varepsilon(\mathbf{p}_1) - \varepsilon(\mathbf{p}') - \varepsilon(\mathbf{p}'_1)),$$

³² Такие условия реализуются, например, в плазме, нагреваемой протекающим по ней током: передача энергии от лёгких частиц к тяжёлым происходит очень медленно, поэтому газ электронов имеет температуру много большую, чем газ ионов.

интегрирование по скорости центра масс пары частиц после столкновения $\mathbf{V}' = \frac{\mathbf{p}' + \mathbf{p}'_1}{2m}$ и величине их относительной скорости $v'_{\text{отн}} = \frac{|\mathbf{p}' - \mathbf{p}'_1|}{m}$.

Решение:

Перейдем от переменных $\mathbf{p}', \mathbf{p}'_1$ к переменным \mathbf{V}' и $\mathbf{v}'_{\text{отн}}$:

$$\begin{aligned} \int \delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}' - \mathbf{p}'_1) \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) + \varepsilon(\mathbf{p}_1) - \varepsilon(\mathbf{p}') - \varepsilon(\mathbf{p}'_1)) d^3 p' d^3 p'_1, &= \\ = 8m^6 \int \delta(2m(\mathbf{V} - \mathbf{V}')) & \\ \cdot \delta(mV^2 + mv_{\text{отн}}^2/4 - mV'^2 + mv_{\text{отн}}'^2/4) d^3 V' d^3 v'_{\text{отн}} &= \\ = m^2 v_{\text{отн}} d\Omega'. & \end{aligned}$$

В итоге

$$I = \int \frac{d\sigma}{d\Omega'} v_{\text{отн}} (f f_1 - f' f'_1) d\Omega' d^3 p_1$$

(множитель m^{-2} считаем включенным в коэффициент пропорциональности в условии, дифференциальное сечение рассеяния молекул зависит от угла между $\mathbf{v}'_{\text{отн}}$ и $\mathbf{v}_{\text{отн}} = (\mathbf{p} - \mathbf{p}_1)/m$).

Задача 157. Получить из кинетического уравнения вид равновесного распределения по скоростям в газе в отсутствие внешних полей.

Решение:

Очевидно, что искомое распределение должно быть пространственно однородным, функция распределения не зависит от t и \mathbf{r} . Поскольку также $\mathbf{F} = 0$, получаем $I = 0$. Распределение должно быть изотропным, функция распределения может зависеть только от модуля \mathbf{p} , т.е. только от энергии. Условие $I = 0$ сводится к равенству $f(\varepsilon)f(\varepsilon_1) = f(\varepsilon')f(\varepsilon'_1)$ при условии $\varepsilon + \varepsilon_1 = \varepsilon' + \varepsilon'_1$, иначе говоря, $f(\varepsilon)f(\varepsilon_1) = F(E)$, где $E = \varepsilon + \varepsilon_1$. Записав это равенство в виде $\ln f(\varepsilon) + \ln f(E - \varepsilon) = \ln F(E)$, продифференцируем его по ε :

$$\frac{f'(\varepsilon)}{f(\varepsilon)} - \frac{f'(\varepsilon_1)}{f(\varepsilon_1)} = 0.$$

Поскольку значения ε и ε_1 произвольны, это равенство означает, что $f'(\varepsilon)/f(\varepsilon) = -\beta$, где β — постоянная, не зависящая от ε . В итоге получаем

$$f(\varepsilon) = e^{\alpha - \beta\varepsilon},$$

т. е. распределение Максвелла.

Переходя к ферми-газу, следует учесть иную нормировку функции распределения,[12]. Для ферми-частиц условие $I = 0$ записывается в виде

$$f(\varepsilon)f(\varepsilon_1)(1 - f(\varepsilon'))(1 - f(\varepsilon'_1)) = f(\varepsilon')f(\varepsilon'_1)(1 - f(\varepsilon))(1 - f(\varepsilon_1)),$$

где последние два сомножителя в обеих частях равенства учитывают, что фермионы подчиняются принципу Паули: состояния, в которые они рассеиваются, должны быть свободны. Если обе части равенства разделить на $f(\varepsilon)f(\varepsilon_1)f(\varepsilon')f(\varepsilon'_1)$, то мы сведем задачу к предыдущей, но для функции $1/f - 1$, т.е.

$$\frac{1}{f(\varepsilon)} - 1 = e^{\alpha + \beta\varepsilon},$$

откуда получаем распределение Ферми–Дирака.

Задача 158. Вычислить коэффициент вязкости.

Решение:

Рассмотрим течение жидкости, скорость которой направлена вдоль оси x , а вдоль оси z имеет градиент. Если в жидкости выделить единичную площадку с нормалью вдоль оси z , на нее будет действовать сила вдоль оси x

$$F_x = -\eta \frac{\partial u_x}{\partial z} \quad (395)$$

С другой стороны эта сила равна результирующей x -составляющей плотности потока импульса P_{ixz} , выражение для которого можно записать через функцию распределения в виде

$$\Pi_{xz} = \int mv_x v_z f d^3v = \int mv_x v_z \delta f d^3v, \quad (396)$$

поскольку равновесная функция распределения симметрична по скорости. Для стационарного течения и в отсутствии объемных сил уравнение Больцмана сводится к

$$v_z \frac{\partial f}{\partial z} = -\frac{\delta f}{\tau}. \quad (397)$$

В левую часть мы подставляем равновесную функцию распределения, сдвинутую в пространстве скоростей на значение макроскопической скорости течения жидкости вдоль оси x

$$f(v_x - u_x(z), v_y, v_z) \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial z} = \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \left(-\frac{\partial u_x}{\partial z} \right) \quad (398)$$

откуда

$$-\eta \frac{\partial u_x}{\partial z} = \tau m \int v_x v_z v_z \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \frac{\partial u_x}{\partial z} dv_x dv_y dv_z \quad (399)$$

окончательно

$$\eta = \tau m n \langle v_z^2 \rangle = \frac{1}{3} \tau m n \langle v^2 \rangle = \frac{2}{3} \tau n \langle \varepsilon \rangle \quad (400)$$

Задача 159. Выразить поток тепла в металле через скорости и энергии квазичастиц. (О квазичастицах см. задачу 63.)

Решение:

Плотность потока тепла это плотность потока энергии квазичастиц:

$$\mathbf{q} = \int \mathbf{v} \epsilon(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}) d^3 p.$$

Интегрирование проводится по всем значениям \mathbf{p} , скорость квазичастицы $\mathbf{v} = \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{p}} = v_0 \frac{\mathbf{p}}{p} \operatorname{sgn}(p - p_0)$, фактически вклад дает область $|p - p_0| \lesssim T$, причем нужно сложить вклады электронов ($p > p_0$) и дырок ($p < p_0$).

Результат совпадает с выражением потока через энергию электронов

$$\mathbf{q} = \int \mathbf{v} (\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon_0) f(\mathbf{p}) d^3 p.$$

(Подробнее — в [17, § 3.4].)

Задача 160. Рассматриваем фотонный газ с очень малой примесью вещества. Пусть рассеяние фотонов на этой примеси приводит к длине пробега фотонов l . В таком фотонном газе волны, в которых концентрация фотонов оказывается переменной, могут распространяться, если длина волны их велика по сравнению с l . Найти скорость таких волн.

Решение:

Кинетическое уравнение, описывающее изменение функции распределения фотонов,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = I.$$

Здесь скорость фотона $\mathbf{v} = c^2 \mathbf{p}/\varepsilon$, $\varepsilon = cp$ — энергия фотона.

Интеграл столкновений

$$I \propto \int [w(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}) f(\mathbf{p}') - w(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}') f(\mathbf{p})] d^3 p'.$$

Будем считать, что столкновения фотонов с частицами вещества являются упругими, $\varepsilon(\mathbf{p}') = \varepsilon(\mathbf{p})$, и что $w(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}) = w(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}')$.

Тогда $\int \varepsilon I d^3 p = 0$, $\int \mathbf{p} I d^3 p = 0$.

Примем также, что в каждой „точке“ достигается локальное равновесие, в частности, фотонный газ имеет некоторую среднюю скорость \mathbf{V} , и в системе отсчета, которая движется с такой скоростью, распределение частиц по импульсам $f_0(\mathbf{p})$ можно считать изотропным (и равновесным). В случае, когда рассматривается обыкновенный газ, подобные предположения приводят к уравнениям газодинамики идеального газа. Ограничимся случаем, когда средняя скорость фотонного газа является нерелятивистской: $V \ll c$ (это означает, что амплитуда волны мала).

Функция распределения f в исходной системе может быть выражена через функцию распределения f_0 в системе, имеющей скорость³³ \mathbf{V} :

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = f_0 \left(\mathbf{p} - \frac{\mathbf{V}\varepsilon}{c^2} \right) = f_0(\mathbf{p}) + \delta f, \quad \delta f = -\frac{\mathbf{V}\varepsilon}{c^2} \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}.$$

При замене $\mathbf{v} \rightarrow -\mathbf{v}$ функция f_0 не изменяется, а $\delta f \rightarrow -\delta f$.

Как и для обыкновенного газа, концентрация фотонного газа $n = \int f d^3 p = \int f_0 d^3 p$, поправочное слагаемое в функции распределения выпадает. Плотность потока $j_k = \int v_k f d^3 p$. При вычислении интеграла вклад дает только поправочное слагаемое³⁴.

Проинтегрируем кинетическое уравнение по $d^3 p$. В результате получаем уравнение непрерывности

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial j_i}{\partial x_i} = 0.$$

Умножим кинетическое уравнение на v_k и проинтегрируем по $d^3 p$. При этом в интеграле $\int v_k v_i f_0 d^3 p$ можно заменить $v_k v_i$ на $c^2 \delta_{ki} / 3$, а вклад слагаемого δf исчезает.

$$\frac{\partial j_k}{\partial t} + \frac{c^2}{3} \frac{\partial n}{\partial x_k} = 0.$$

Полученная система уравнений приводит к волновому уравнению

$$\frac{\partial^2 n}{\partial t^2} = \frac{c^2}{3} \Delta n.$$

³³Используем преобразование Лоренца для импульса и энергии при $V \ll c$. Подробнее о преобразовании функции распределения см. [4, § 10].

³⁴Несложно получить также, что $\mathbf{j} = \mathbf{V}n$.

Скорость волн плотности в фотонном газе в описанных условиях оказалась равна $\frac{c}{\sqrt{3}}$.

Такое же значение скорости звука можно получить, рассматривая фотонный газ как сплошную среду с уравнением состояния $P = \frac{E}{3V} = \frac{1}{3} \rho c^2$.³⁵

Подобные же волны, распространяющиеся в фононном газе, наблюдаются в сверхтекучем гелии при температурах ниже 0,5К. (В этом случае c — скорость обычного, „первого“, звука.) Это тепловые волны, которые могут распространяться на расстояния, много большие длины волн. Их называют вторым звуком.

Задача 161. Вдоль отрезка проволоки, к которому приложена постоянная разность потенциалов, течёт ток. Как изменится ток, если включить постоянное однородное магнитное поле, перпендикулярное проволоке? Воспользоваться τ -приближением для интеграла столкновений. (Задача об эффекте Холла).

Решение:

Пусть $OZ \parallel \mathbf{B}$, а $OX \parallel \mathbf{E}$. Электрическое поле и отличие δf функции распределения от равновесной f_0 считаем малыми, а магнитное поле — нет. Кинетическое уравнение после линеаризации

$$\frac{eE}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} + \omega \left(v_x \frac{\partial \delta f}{\partial v_y} - v_y \frac{\partial \delta f}{\partial v_x} \right) = -\frac{\delta f}{\tau}, \quad \omega = \frac{eB}{mc}.$$

Если есть электрическое поле, направленное по оси x , то возмущение функции распределение $\delta f = A'(\varepsilon)v_x$. При включении магнитного поля вдоль оси z траектории заряженных частиц искривляются и появляется y -компоненты скорости, поэтому ищем решение в виде

$$\delta f = A(\varepsilon)v_x + B(\varepsilon)v_y.$$

(Любители математической строгости могут решить кинетическое уравнение методом характеристик). Приравняв по отдельности слагаемые, содержащие v_x и v_y , находим

$$A = -\frac{\tau e E}{1 + (\omega \tau)^2} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}, \quad B = \omega \tau A.$$

³⁵Заметим в связи с этим, что приведенный выше вывод можно было бы применить и к газу ультрарелятивистских фермионов.

При вычислении плотности тока в $j_x = e \int v_x \delta f d^3 v$ войдёт только A , причем множитель $1/[1 + (\omega\tau)^2]$, содержащий всю зависимость от магнитного поля, можно вынести за знак интеграла. Поэтому

$$j_x = \frac{\sigma E}{1 + (\omega\tau)^2}, \quad j_y = \omega\tau j_x, \quad \sigma = \frac{ne^2\tau}{m}. \quad (401)$$

При дальнейшем анализе ответа надо учитывать, что вектор \mathbf{j} направлен вдоль провода, а электрическое поле имеет как продольную, так и поперечную по отношению к току компоненты, $\mathbf{E} = \mathbf{E}_\perp + \mathbf{E}_{||}$.

Обозначим угол между плотностью тока и электрическим полем θ ,

$$j = \sqrt{j_x^2 + j_y^2} = \frac{\sigma E}{\sqrt{1 + (\omega\tau)^2}}, \quad (402)$$

$$\cos \theta = \frac{j_x}{j} = \frac{1}{\sqrt{1 + (\omega\tau)^2}}, \quad \operatorname{tg} \theta = \frac{j_y}{j_x} = \omega\tau, \quad (403)$$

$$E_{||} = E \cos \theta = \frac{E}{\sqrt{1 + (\omega\tau)^2}}, \quad j = \sigma E_{||}. \quad (404)$$

$$E_\perp = E_{||} \operatorname{tg} \theta = \omega\tau \frac{j}{\sigma} = \frac{Hj}{nec}. \quad (405)$$

В итоге оказывается, что зависимость тока от поперечного магнитного поля (эффект, называемый магнетосопротивлением) в рассматриваемой модели отсутствует. Появление поперечного напряжения — это эффект Холла. Выполняется соотношение

$$E_\perp = RHj, \text{ где } R = 1/nec — \text{коэффициент Холла.}$$

Такой же результат можно получить, отвлекаясь от разброса по скоростям электронов и представляя, что у них есть некая средняя скорость, направленная вдоль проводника $\mathbf{v} \equiv \mathbf{v}_{||}$. Тогда среднее значение действующей на электрон в направлении поперек провода силы должно быть равно нулю: $e\mathbf{E}_\perp + (e/c)[\mathbf{v}_{||}\mathbf{H}] = 0$; с учётом равенства $j = nev_{||}$ это приводит к найденному выше значению коэффициента Холла и отсутствию магнетосопротивления.

Заметим, что обосновать τ -приближение в этой задаче в случае произвольной величины магнитного поля едва ли удастся.

Задача 162. Найти изменение сопротивления проводника при включении магнитного поля \mathbf{B} , перпендикулярного электрическому полю \mathbf{E} , если есть два типа носителей заряда, например, электроны и дырки.

Решение:

Используя (401) суммируем вклады в ток двух носителей:

$$j_x = (\alpha_1 + \alpha_2)E, \quad \alpha_i = \frac{\sigma_i}{1 + (\omega_i \tau_i)^2}, \quad \omega_i = \frac{e_i H}{m_i c}, \quad \sigma_i = \frac{n_i e_i^2 \tau_i}{m_i}, \quad i = 1, 2$$

$$j_y = (\beta_1 + \beta_2)E, \quad \beta_i = \omega_i \tau_i \alpha_i.$$

Далее, подобно (403–404),

$$E_{\parallel} = \frac{j_x}{j} E = \frac{j}{\sigma}, \quad \sigma = \frac{j^2}{j_x E} = \frac{(\alpha_1 + \alpha_2)^2 + (\beta_1 + \beta_2)^2}{\alpha_1 + \alpha_2}.$$

В этой модели проводимость зависит от магнитного поля. Важен факт появления серьёзной зависимости, самому же полученному характеру зависимости не следует придавать большого значения, т. к. на виде её в реальных условиях сильно сказывается анизотропия зависимости энергии электронов от квазимпульса, которой мы не учитывали. Холловский коэффициент оказывается равен

$$R = \frac{\sigma_1^2 R_1 + \sigma_2^2 R_2}{(\sigma_1 + \sigma_2)^2},$$

где $R_i = 1/(e_i n_i c)$.

Задача 163. Выразить коэффициент затухания поперечного звука в металле, обусловленный вязкостью электронного газа, при условии, что длина волны звука много больше длины свободного пробега электронов ($k v \tau \ll 1$), причём главную роль в рассеянии электронов играют примеси.

Решение:

Направим ось x по волновому вектору \mathbf{k} звука, ось y — по направлению смещения \mathbf{u} вещества в звуковой волне. Примем, что $\mathbf{u} \propto \exp(i(kx - \omega t))$. Уравнение, определяющее распространение звуковой волны,

$$\rho \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - v_s^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) = -\frac{\partial \Pi_{yx}}{\partial x}, \quad (406)$$

где v_s — скорость звука, Π_{yx} — компонента тензора плотности потока импульса, переносимого электронным газом:

$$\Pi_{yx} = \int p_y v_x f d^3 p \quad (407)$$

Будем считать, что состояние электронного газа близко к локально равновесному:

$$f = f_0(|\mathbf{v} - \dot{\mathbf{u}}(x, t)|) + \delta f \quad (408)$$

Учитывая, что $\omega \ll kv \ll 1/\tau$, в левой части кинетического уравнения

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} = -\frac{\delta f}{\tau}$$

следует сохранить только вклад f_0 во втором члене, так что

$$v_x(i k)(i \omega u) \frac{\partial f_0}{\partial v_y} = -\frac{\delta f}{\tau}, \quad (409)$$

$$\Pi_{yx} = -k \omega \tau u m \int v_x^2 v_y \frac{\partial f_0}{\partial v_y} d^3 p = k \omega \tau m n u \frac{v_0^2}{5}. \quad (410)$$

Из (406) получаем $\rho(\omega^2 - v_s^2 k^2)u = -ik\Pi_{yx}$, откуда ³⁶

$$k = \frac{\omega}{v_s} + \frac{i\gamma}{2}, \quad \gamma = \frac{n m v_0^2 \omega^2 \tau}{5 \rho v_s^3} \sim \omega \tau k.$$

Величина γ характеризует потери энергии: $|u|^2 \propto \exp(-\gamma x)$.

Задача 164. Выразить τ в предыдущей задаче через сечение рассеяния электронов. Рассеяние электронов на примесях считать упругим. (Подразумевается, что процесс происходит при низкой температуре, так что влиянием на движение электронов колебаний кристаллической решетки можно пренебречь.)

Решение:

Зависимость добавки к функции распределения (409) от направления вектора $\mathbf{p} = np$ имеет вид

$$\delta f = A(\varepsilon) n_x n_y. \quad (411)$$

В интеграл столкновений входит разность $\delta f(\mathbf{p}) - \delta f(\mathbf{p}')$. Мы подставим $\delta f(\mathbf{p}')$ в эту разность, представив импульс электрона после рассеяния в виде $\mathbf{p}' = p(\mathbf{n} \cos \theta + \mathbf{n}'_\perp)$, и проведем усреднение по азимутальному направлению вектора \mathbf{n}'_\perp (учитывая, что входящее в интеграл столкновений сечение рассеяния от этого направления не зависит).

$$\delta f(\mathbf{p}') = A(\varepsilon) n'_x n'_y = A(\varepsilon) (\cos \theta n_x + n'_{\perp x})(\cos \theta n_y + n'_{\perp y}).$$

³⁶ Мы не учитывали некоторые существенные для задач физики твёрдого тела обстоятельства, например, тот факт, что зависимость $\varepsilon(\mathbf{p})$ изменяется при деформации вещества.

Указанное усреднение сводится к заменам:

$$\langle n'_{\perp i} \rangle = 0, \quad \langle n'_{\perp i} n'_{\perp j} \rangle = \frac{1}{2} (\mathbf{n}'_{\perp})^2 (\delta_{ij} - n_i n_j) = \frac{1}{2} \sin^2 \theta (\delta_{ij} - n_i n_j). \quad (412)$$

В частности, $\langle n'_x n'_y \rangle = (\cos^2 \theta - \frac{1}{2} \sin^2 \theta) n_x n_y$. Поэтому разность $\delta f(\mathbf{p}) - \delta f(\mathbf{p}')$ заменяется на $\delta f(\mathbf{p})(1 - \langle n'_x n'_y \rangle) = \delta f(\mathbf{p}) \frac{3}{2} \sin^2 \theta$.

В итоге приходим к ответу

$$\frac{1}{\tau} = \frac{3}{2} n_0 v \int \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin^2 \theta d\Omega.$$

Связь величины τ с сечением рассеяния электронов оказалась не такой, как в задачах о проводимости и о теплопроводности.

Задача 165. Вычислить коэффициент теплопроводности для газа нейтральных молекул, принимая для интеграла столкновений τ -приближение.

Решение:

Интересуясь коэффициентом теплопроводности, мы подразумеваем, что длина свободного пробега молекул мала по сравнению с характерным расстоянием, на котором изменяется температура. Это значит, что в первом приближении в каждой „точке“ газа есть локальное равновесие, можно представлять функцию распределения в виде максвелловской функции распределения

$$f_0 = A n(x) e^{-\varepsilon/T(x)}, \quad (413)$$

где $n(x)$ и $T(x)$ локальные значения концентрации и температуры газа, $\varepsilon = p^2/2m$. Имея в виду, что $d^3p \propto \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon$, множитель A определяем условием

$$\int_0^\infty f_0 \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = n, \quad AT^{3/2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = 1. \quad (414)$$

Давление газа в согласии с (413) равно $P = nT$. Давление не должно изменяться от точки к точке, так что градиент температуры и градиент концентрации связаны соотношением

$$\frac{1}{n} \frac{dn}{dx} + \frac{1}{T} \frac{dT}{dx} = 0. \quad (415)$$

Поток тепла обусловлен отклонением функции распределения от равновесной, $f = f_0 + \delta f$. Заявленное в условии τ -приближение подразумевает, что кинетическое уравнение линеаризовано, т. е.

$$v_x \frac{\partial f_0}{\partial x} = - \frac{\delta f}{\tau}. \quad (416)$$

С учётом (413),(414),(415) получаем

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_0}{\partial x} &= \frac{\partial f_0}{\partial n} \frac{dn}{dx} + \frac{\partial f_0}{\partial T} \frac{dT}{dx} = \\ &= \frac{f_0}{n} \frac{dn}{dx} + \frac{f_0 \varepsilon}{T^2} \frac{dT}{dx} - \frac{3}{2} \frac{f_0}{T} \frac{dT}{dx} = \frac{f_0}{T} \left(\frac{\varepsilon}{T} - \frac{5}{2} \right) \frac{dT}{dx},\end{aligned}$$

так что

$$\delta f = -\tau v_x \frac{f_0}{T} \left(\frac{\varepsilon}{T} - \frac{5}{2} \right) \frac{dT}{dx}. \quad (417)$$

Заметим, что вклады δf в концентрацию $n \propto \int \delta f d^3 p$ и плотность энергии $n\langle\varepsilon\rangle \propto \int \varepsilon \delta f d^3 p$ обращаются в ноль (из-за наличия множителя v_x). По той же причине δf не даст поправки и к давлению.³⁷ Нетрудно убедиться, что δf не приведёт и к появлению потока частиц: $\int v_x \delta f d^3 p \propto \int_0^\infty e^{-\varepsilon/T} (\varepsilon/T - 5/2) \varepsilon \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = 0$ (вместо v_x^2 подставлено $2\varepsilon/3m$).

Плотность потока энергии,

$$\begin{aligned}q &= \int_0^\infty \varepsilon v_x \delta f \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = -\frac{2\tau}{3mT} \frac{dT}{dx} \int_0^\infty f_0 \varepsilon^2 \left(\frac{\varepsilon}{T} - \frac{5}{2} \right) \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = \\ &= -\frac{2\tau}{3m} \frac{dT}{dx} A n T^{5/2} \left(\Gamma\left(\frac{9}{2}\right) - \frac{5}{2} \Gamma\left(\frac{7}{2}\right) \right) = -\kappa \frac{dT}{dx},\end{aligned}$$

где

$$\kappa = \frac{5nT\tau}{2m} \quad (418)$$

— коэффициент теплопроводности.

Следует сознаться, что τ -приближение не удаётся обосновать. Более корректный подход к решению кинетического уравнения можно найти, например, в [3, § 6 - 10],[23, § 7 - 13], [24, гл. II].

Выражение (418) справедливо по порядку величины, при этом нужно иметь в виду, что $\tau \sim l/v$, где $l \sim 1/n\sigma$ — длина свободного пробега,

³⁷ Именно этот факт позволяет интерпретировать входящие в (413) величины n и T как концентрацию и температуру газа; добавка к плотности потока импульса, фактически определяющей давление, $\delta\Pi_{xx} \propto \int v_x p_x \delta f d^3 p$, также обращается в ноль, подтверждая законность равенства $P = nT$ и тем самым соотношения (415).

$v \sim \sqrt{T/m}$ — тепловая скорость, σ — сечение рассеяния молекул. Поэтому $\kappa \sim \frac{1}{\sigma} \sqrt{\frac{T}{m}}$. Обратим внимание, что теплопроводность оказалась не зависящей от концентрации газа.

Разумеется, при очень малой концентрации газа, когда на длину свободного пробега нельзя смотреть как на исчезающую малую (например, для газа между стенками колбы термоса), зависимость от концентрации вполне существенна.

Задача 166. Узкий пучок света распространяется в слабо неоднородной среде. Найти функцию распределения $f(z, \vec{\rho}, \vec{n})$ по поперечным размерам пучка ρ и углам разлета $\vec{n} = \vec{v}_\perp / |\vec{v}|$, а также $\langle \vec{\rho}^2 \rangle$, $\langle \vec{n}^2 \rangle$, $\langle \vec{n} \cdot \vec{\rho} \rangle$ в зависимости от пройденного в среде расстояния z . Считать углы рассеяния в неоднородной среде малыми ($|\vec{n}| \ll 1$).

Решение:

Запишем кинетическое уравнение для функции распределения $f(z, \vec{\rho}, \vec{n})$ в стационарном случае

$$\frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{v} \approx \frac{\partial f}{\partial z} + \frac{\partial f}{\partial \vec{\rho}} \cdot \vec{n} = St[f], \quad (419)$$

а интеграл столкновений имеет вид

$$St[f] \approx n \int d\sigma(u) [f(\vec{r}, \vec{n} - \vec{u}) - f(\vec{r}, \vec{n})], \quad (420)$$

где n — плотность числа рассеивателей в среде, для малых углов рассеяния $v_z \approx c$ — скорости света, $d\sigma(u)$ — дифференциальное сечение, в результате которого происходит рассеяние на угол u . Для малых углов рассеяния можно разложить выражение в квадратных скобках в интеграле столкновений до второго порядка по u и, с учетом того, что

$$\int d\sigma(u) u_x = \int d\sigma(u) u_y = \int d\sigma(u) u_x u_y = 0, \quad (421)$$

получаем

$$\frac{\partial f}{\partial z} + \frac{\partial f}{\partial \vec{\rho}} \cdot \vec{n} = \frac{\theta_0^2}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial n_x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial n_y^2} \right), \quad (422)$$

где

$$\theta_0^2 = n \int d\sigma(u) u_x^2 \quad (423)$$

есть среднеквадратичный угол рассеяния на единицы длины.

Если бы в кинетическом уравнении отсутствовал член $\frac{\partial f}{\partial \vec{\rho}} \cdot \vec{n}$, то решением, удовлетворяющим начальному условию $f(z \rightarrow 0) \rightarrow \delta(\vec{n})$, было бы

$$f(z, \vec{n}) = A(z) \exp\left(-\frac{\vec{n}^2}{2\theta_0^2 z}\right). \quad (424)$$

Решение полного кинетического уравнения, удовлетворяющего начальному условию $f(z \rightarrow 0) \rightarrow \delta(\vec{n})\delta(\vec{\rho})$, можно угадать:

$$f(z, \vec{n}, \vec{\rho}) = B(z) \exp\left(-\frac{\alpha \vec{n}^2}{z} - \frac{\beta \vec{n} \cdot \vec{\rho}}{z^2} - \frac{\gamma \vec{\rho}^2}{z^3}\right). \quad (425)$$

(степени z расставлены из соображений размерности). Подставляя это выражение в кинетическое уравнение, найдем неизвестные α, β, γ , приравнивая коэффициенты при $\vec{n}^2, \vec{n} \cdot \vec{\rho}, \vec{\rho}^2$. Имеем

$$\frac{\partial f}{\partial z} = \frac{B'}{B} f + f \left(\frac{\alpha \vec{n}^2}{z^2} + \frac{2\beta \vec{n} \cdot \vec{\rho}}{z^3} + \frac{3\gamma \vec{\rho}^2}{z^4} \right), \quad (426)$$

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{\rho}} \cdot \vec{n} = f \left(-\frac{\beta \vec{n}^2}{z^2} - \frac{2\gamma \vec{n} \cdot \vec{\rho}}{z^3} \right), \quad (427)$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial n_x^2} = f \left[-\frac{2\alpha}{z} + \left(\frac{2\alpha n_x}{z} + \frac{\beta \rho_x}{z^2} \right)^2 \right] \quad (428)$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial n_x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial n_y^2} = f \left(-\frac{4\alpha}{z} + \frac{4\alpha^2 \vec{n}^2}{z^2} + \frac{4\alpha\beta \vec{n} \cdot \vec{\rho}}{z^3} + \frac{\beta^2 \vec{\rho}^2}{z^4} \right). \quad (429)$$

После подстановки в кинетическое уравнение получаем систему

$$3\gamma = \frac{\theta_0^2}{2}\beta^2, \quad 2\beta - 2\gamma = 2\theta_0^2\alpha\beta, \quad \alpha - \beta = 2\theta_0^2\alpha^2, \quad (430)$$

имеющую два набора решений

$$\alpha = 2/\theta_0^2, \quad \beta = -6/\theta_0^2, \quad \gamma = 6/\theta_0^2, \quad (431)$$

и

$$\alpha = 3/2\theta_0^2, \quad \beta = -3/\theta_0^2, \quad \gamma = 3/2\theta_0^2. \quad (432)$$

Однако последнее решение дает ненормируемую функцию распределения

$$f(z, \vec{n}, \vec{\rho}) = C(z) \exp \left[-\frac{3}{2\theta_0^2 z} \left(\vec{n} - \frac{\vec{\rho}}{z} \right)^2 \right]. \quad (433)$$

Первое же решение дает искомую функцию распределения

$$f(z, \vec{n}, \vec{\rho}) = B(z) \exp \left(-\frac{2\vec{n}^2}{\theta_0^2 z} + \frac{6\vec{n} \cdot \vec{\rho}}{\theta_0^2 z^2} - \frac{6\vec{\rho}^2}{\theta_0^2 z^3} \right). \quad (434)$$

Более строгий подход состоит в решении кинетического уравнения

$$\frac{\partial f}{\partial z} + \frac{\partial f}{\partial \vec{\rho}} \cdot \vec{n} = \frac{\theta_0^2}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial n_x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial n_y^2} \right), \quad (435)$$

после выполнения фурье-преобразования, методом характеристик. Из физических соображений понятно, что картина рассеяния является независимой в двух взаимно перпендикулярных плоскостях xz и yz , поэтому запишем уравнение только для xz плоскости:

$$\frac{\partial f}{\partial z} + \frac{\partial f}{\partial \rho_x} n_x = \frac{\theta_0^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial n_x^2}. \quad (436)$$

Подставляя фурье-разложение функции $f(z, \rho_x, n_x)$

$$f(z, \rho_x, n_x) = \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{d\mu}{2\pi} e^{ik\rho_x + i\mu n_x} \tilde{f}(z, k, \mu) \quad (437)$$

в кинетическое уравнение, получим

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial z} - k \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \mu} = -\frac{\mu^2 \theta_0^2 \tilde{f}}{2}, \quad (438)$$

где мы представили во втором члене $i n_x e^{i\mu n_x}$ как $\partial(e^{i\mu n_x})/\partial\mu$ и проинтегрировали по частям. Решая это уравнение методом характеристик

$$\frac{dz}{1} = -\frac{d\mu}{k} = -\frac{d\tilde{f}}{\mu^2 \theta_0^2 \tilde{f}/2},$$

получим из первого равенства $\mu = C_1 - kz$. Поставляя это выражение в третий член и приравнивая первому, после интегрирования получим

$$\tilde{f} = \exp \left[-\frac{\theta_0^2}{2} (\mu^2 z + k\mu z^2 + k^2 z^3/3) \right].$$

Константа интегрирования определена из начального условия $\tilde{f}(z = 0, k, \mu) = 1$. После обратного фурье-преобразования получаем

$$f(z, \rho_x, n_x) = \frac{\sqrt{3}}{\pi \theta_0^2 z^2} e^{-3\rho_x^2/2\theta_0^2 z^3} e^{-2(n_x - 3\rho_x/2z)^2/\theta_0^2}. \quad (439)$$

Интегрируя по n_x , получаем

$$\langle \vec{\rho}^2 \rangle = \langle \rho_x^2 \rangle + \langle \rho_y^2 \rangle = 2\langle \rho_x^2 \rangle = \frac{2\theta_0^2 z^3}{3}, \quad (440)$$

где мы учли такой же вклад от рассеяния в плоскости yz . Представив показатель экспоненты в другом виде

$$-\frac{6}{\theta_0^2 z^3} \left(\vec{\rho} - \frac{\vec{n}z}{2} \right)^2 - \frac{\vec{n}^2}{2\theta_0^2 z}, \quad (441)$$

получаем после интегрирования по $d^2\vec{\rho} = d\rho_x d\rho_y$

$$\langle \vec{n}^2 \rangle = 2\theta_0^2 z. \quad (442)$$

Аналогично вычисляется $\langle \vec{n} \cdot \vec{\rho} \rangle$

$$\begin{aligned} \langle \vec{n} \cdot \vec{\rho} \rangle &= 2\langle n_x \rho_x \rangle = \frac{2}{I_0} \int dn_x \int d\rho_x n_x \rho_x \exp \left[-\frac{6}{\theta_0^2 z^3} \left(\vec{\rho} - \frac{\vec{n}z}{2} \right)^2 - \frac{\vec{n}^2}{2\theta_0^2 z} \right] = \\ &= \frac{2}{I_0} \int dn_x \int d\rho_x n_x \left(\rho'_x + \frac{n_x z}{2} \right) \exp \left[-\frac{6}{\theta_0^2 z^3} \vec{\rho}'^2 - \frac{\vec{n}^2}{2\theta_0^2 z} \right] = z \langle n_x^2 \rangle = \theta_0^2 z^2, \end{aligned} \quad (443)$$

где использовано обозначение I_0 для нормировочного множителя функции распределения.

A Теплоёмкость подвешенного шарика

В этом разделе рассмотрена задача: *одинакова ли теплоёмкость твердого шарика в случае, если он подвешен, и в случае, если лежит на столе?*

В „физическом фольклоре“ с давних пор имеет хождение задача о разнице между теплоёмкостями шарика, когда он лежит на столе

и когда он подвешен. Обычно эту задачу предлагают школьникам и считают нетрудной. Во многих случаях удовлетворяются следующим **неправильным** решением.

Теплоёмкость лежащего шарика C_1 больше, чем висящего C_2 , так как в первом случае при нагревании на ΔT градусов кроме увеличения внутренней энергии шарика нужно совершить еще и работу по подъёму его центра тяжести $A = mg\alpha\Delta T$, а во втором — подобная работа имеет другой знак (m — масса шарика, r — его радиус, α — линейный коэффициент теплового расширения). Поэтому

$$C_1 - C_2 = 2mg\alpha$$

,„Разоблачить“ это решение несложно. Представим себе тепловую машину, в которой используется указанная работа $2A$. (Скажем, днем, когда шарик нагрет, закрепляем его на подвесе, а вечером, когда он, охладившись, подтянется вверх, поднимаем подставку). Коэффициент полезного действия такой тепловой машины

$$\eta = \frac{A}{C_1 \Delta T} = \frac{2mg\alpha}{C_1}$$

окажется не зависящим от разницы температур ΔT , а это противоречит условию Карно:

$$\eta \leq \frac{\Delta T}{T}$$

(T — температура „холодильника“, в данном случае — вечерняя температура). Таким образом, мы получаем фактически вечный двигатель второго рода.

Правильное решение нам будет удобнее изложить для несколько изменённой модели: будем считать, что шарик тяжёлый, но маленький и подвешивается на длинной нити; подъём его обеспечивается изменением длины нити при изменении её температуры и речь идет о разности теплоёмкостей нити, растягиваемой силой $f = mg$ или висящей свободно. Очевидно, все возникшие вопросы сохраняются. В согласии с задачей о шарике примем, что длина нити l зависит от температуры и не зависит от приложенной силы

$$l = l_0(1 + \alpha(T - T_0)).$$

Стартуя от основного соотношения

$$dE = TdS + fdl,$$

где dE — приращение энергии нити, dS — приращение её энтропии, а dl — её удлинение, удобно перейти к потенциалу Гиббса $\Phi = E - TS - fl$, для которого

$$d\Phi = -SdT - ldf. \quad (1)$$

Ключом к задаче является рассмотрение изотермических процессов „включения“ и „выключения“ силы f . Изменение потенциала Φ в таком изотермическом процессе сразу же следует из равенства (1):

$$\Phi(T, f) = \Phi(T, 0) - l(T)f.$$

Теперь, используя соотношение $S = -\left(\frac{\partial\Phi}{\partial T}\right)_f$, можно найти прирост энтропии в процессе нагружения нити силой:

$$S(T, f) = S(T, 0) + f \frac{dl(T)}{dT} = S(T, 0) + fl\alpha. \quad (2)$$

(Подразумевается медленное, равновесное нагружение). Теплоёмкость нити при заданной нагрузке определяется соотношением

$$C_f = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_f,$$

так что

$$C(T, f) = C(T, 0) + Tf \frac{d^2l}{dT^2} = C(T, 0) :$$

теплоёмкость нагруженной нити равна теплоёмкости ненагруженной. Очевидно, то же относится и к шарику, с которого мы начинали.

Откуда же берётся работа в нашей тепловой машине? Прирост энтропии в изотермическом процессе нагружения означает, что в этом процессе нить поглощает тепло $Q = T(S(T, f) - S(T, 0)) = fl\alpha T$. Нагружаем мы нить днём, при температуре $T + \Delta T$, а разгружаем вечером, при температуре T . Поэтому различны и количества тепла, поглощенного при нагружении $Q_a = fl\alpha(T + \Delta T)$ и выделенного при разгрузке $Q_b = fl\alpha T$. Работа A , совершаемая поднимающей шарик нитью, как раз и равна $Q_a - Q_b = fl\alpha\Delta T$. Разумеется, коэффициент полезного действия удовлетворяет условию Карно:

$$\eta = \frac{A}{C_1\Delta T + Q_a} = \frac{\Delta T}{T + \Delta T + (C_1/fl\alpha)\Delta T} \leqslant \frac{\Delta T}{T}.$$

Внутренняя энергия нагруженной нити (нерастяжимой!)

$$E(T, f) = \Phi(T, f) + TS(T, f) + fl(T) = E(T, 0) + fl(T)\alpha T - fl(T)$$

зависит и от температуры и от силы, в отличие от внутренней энергии идеального газа $E_g = C_v T$.

Любопытно оценить, на сколько изменилась бы температура нити при адиабатическом нагружении. Это изменение температуры δT можно найти из условия

$$S(T + \delta T, f) = S(T, 0).$$

Подставив сюда $S(T + \delta T, f)$ из (2) и разложив S по δT , получим

$$\delta T = -\frac{l\alpha T f}{C},$$

что совпадает, конечно же, с $-Q_a/C$. Введя сечение нити s , её плотность ρ и удельную теплоёмкость c , получаем

$$\delta T = \frac{f}{s} \frac{\alpha T}{c\rho}.$$

Для численной оценки примем, что на стальную проволоку сечения 1 мм^2 подвешен груз массы 10 кг; это вызовет натяжение $f/s \approx 0,1$ ГПа, лишь раз в пять меньшее предела прочности. Подставив значения $\alpha \approx 10^{-5} \text{ К}^{-1}$, $T = 300 \text{ К}$, $\rho = 7,8 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, $c \approx 500 \text{ Дж/(кг К)}$, получаем $\delta T \approx -0,1 \text{ К}$ — эффект совсем не большой.

Удлинение нити (которым мы пренебрегали)

$$\delta l = \frac{l}{sY} f, \quad (3)$$

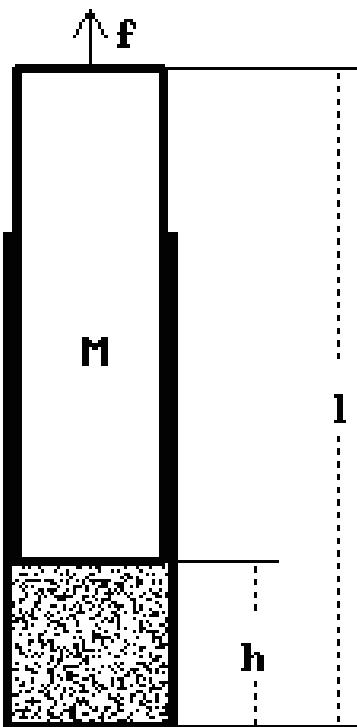
где Y — модуль упругости. Для стали $Y \approx 200 \text{ ГПа}$, так что

$$\frac{\delta l}{l} = \frac{f}{sY} \approx 0,005,$$

действительно, мало.

Даже при таком большом натяжении энергия упругой деформации $\delta E = f\delta l/2$ в несколько раз меньше теплового эффекта Q_a :

$$\frac{\delta E}{Q_a} = 0,2.$$



[17]r[-0pt]5 Модель стержня — газ под тяжёлым поршнем Микроскопический механизм, приводящий к отмеченному тепловому эффекту, не очевиден. Чтобы лучше его понять, построим специальную модель стержня. Пусть стоящий вертикально цилиндр с идеальным газом закрыт поршнем. Высота столба газа h , сечение его s , высота „стержня“ l , вес поршня Mg . В своей модели стержня мы будем учитывать только тепло, получаемое или отдаваемое газом, давление же поршня изображает молекулярное сцепление. Теплоёмкость стержня сводится в таком случае к теплоёмкости газа при постоянном давлении, которая от величины давления не зависит. Имея в виду, что прилагаемые к настоящему стержню силы малы в сравнении с молекулярными силами сцепления ($f/s \ll Y$), будем считать поршень очень тяжелым,

$$P_0 = Mg/s \gg f/s. \quad (4)$$

Удлинение „стержня“ Δl при его нагревании на ΔT определяется урав-

нением состояния газа

$$\frac{P_0(V + s\Delta l)}{T + \Delta T} = \frac{P_0V}{T}, V = hs.$$

Отсюда

$$\Delta l = h \frac{\Delta T}{T},$$

что определяет коэффициент теплового расширения $\alpha = h/lT$.

Поскольку внутренняя энергия идеального газа определяется его температурой, тепло, поглощаемое газом в изотермическом процессе, равно совершаемой им в этом процессе работе. Если приложить к „стержню“ силу f , то он растянется на длину x , определяемую соотношением

$$(Mg/s)(hs) = (Mg - f)(h + x), x = \frac{h}{Mg}f,$$

Газ совершил над поршнем работу $Mgx = fh = f\alpha T$, как раз равную Q . Это работа, совершенная „внутренними силами“ и проявляющаяся в поглощении тепла. Работа же силы f , равная $fx/2$, соответствует энергии упругой деформации. Эта работа мала и мы её не учтываем. Таким образом, сила f , приложенная к стержню, „приводит“ очень малое изменение его длины, и при этом во много раз большие внутренние силы совершают работу, уже не столь малую.

Для настоящего твердого тела тепловое расширение обусловлено ангармоничностью колебаний атомов. Обсуждаемый эффект в этом случае не так подчеркнут, как в приведённой выше модели, где атомы движутся фактически между двумя стенками, в „предельно ангармоничном“ поле.

Интересный и гораздо больший эффект изменения температуры наблюдается для резины: для неё коэффициент теплового расширения намного больше и к тому же отрицательный (см. задачу 2.1). Правда, нерастяжимой резине считать не приходится. Термодинамика стержней с учётом их сжимаемости рассмотрена в учебнике [8].

B Математическое дополнение

В задачах о квантовых газах используются некоторые функции, свойства которых мы приведем здесь для справок.

Введем в рассмотрение функцию $b_a(y)$:

$$b_a(y) = \int_0^\infty \frac{x^a dx}{e^{x+y} - 1}.$$

Можно просто выразить $\frac{db_a(y)}{dy}$:

$$\begin{aligned} \frac{db_a(y)}{dy} &= \int_0^\infty x^a dx \frac{d}{dy} \frac{1}{e^{x+y} - 1} = \int_0^\infty x^a dx \frac{d}{dx} \frac{1}{e^{x+y} - 1} = \\ &= -a \int_0^\infty x^{a-1} dx \frac{1}{e^{x+y} - 1} = -ab_{a-1}(y). \end{aligned} \quad (444)$$

Тогда, после замены $a \rightarrow a + 1$,

$$\int_0^\infty b_a(y) dy = -\frac{1}{a+1} b_{a+1}(y) \Big|_0^\infty = \frac{1}{a+1} b_{a+1}(0). \quad (445)$$

Функция $b_a(y)$ определена при $y \geq 0$ и монотонно убывает с ростом y .

Во многих задачах важно знать функцию $b_a(y)$ вблизи $y = 0$.

$$\begin{aligned} b_a(0) &= \int_0^\infty e^{-x} x^a (1 + e^{-x} + e^{-2x} + \dots) dx = \sum_{n=1}^\infty 1/n^{a+1} \cdot \int_0^\infty x^a e^{-nx} dx = \\ &= \Gamma(a+1) \zeta(a+1). \end{aligned}$$

Приведем для справок значения дзета-функции и $b_a(0)$:

a	1/3	0,5	1	1,5	2
$\zeta(a+1)$	3,601	2,612	1,645	1,342	1,202
$\zeta(a+1)$			$\pi^2/6$		
$b_a(0)$	3,216	2,315	1,645	1,783	2,404
a	2,5	3	3,5	4	5
$\zeta(a+1)$	1,127	1,082	1,055	1,037	1.017
$\zeta(a+1)$		$\pi^4/90$			$\pi^6/945$
$b_a(0)$	3,745	6,494	12,27	24,89	122.08

При $a > 1$, $y \ll 1$ с учетом (444) имеем $b_a(y) = b_a(0) - ab_{a-1}(0)y$.

При $0 < a < 1$, $y > 0$ равенство (444) также справедливо, однако $b'_a(y) \rightarrow \infty$ при $y \rightarrow 0$ так что разлагать функцию $b_a(y)$ в ряд Маклорена нельзя. Введем функцию $F(z) = b_a(z^{1/a})$, которая, как будет видно далее, при $z \rightarrow 0$ имеет конечную производную по z . Поэтому при $z \ll 1$ эту функцию можно представить в виде $F(z) = F(0) + zF'(0)$, а $F'(0)$ находим как $\lim_{z \rightarrow 0} F'(z)$, где

$$F'(z) = -z^{1/a-1}b_{a-1}(z^{1/a}) = -z^{1/a-1} \int_0^\infty \frac{x^{a-1}dx}{e^{x+z^{1/a}} - 1}.$$

После замены $x = z^{1/a}u$ получаем

$$\begin{aligned} F'(z) &= -z^{1/a} \int_0^\infty \frac{u^{a-1}du}{e^{(1+u)z^{1/a}} - 1} = \\ &= -z^{1/a} \int_0^\infty \frac{u^{a-1}du}{(1+u)z^{1/a} + (1+u)^2z^{2/a}/2 + \dots}. \end{aligned}$$

При $z \rightarrow 0$

$$F'(z) \rightarrow - \int_0^\infty \frac{u^{a-1}du}{1+u} = -B(a, 1-a) = -\Gamma(a)\Gamma(1-a) = -\frac{\pi}{\sin \pi a}.$$

В итоге

$$b_a(y) = b_a(0) - \frac{\pi}{\sin \pi a} y^a \quad \text{при } y \ll 1, \quad 0 < a < 1.$$

Точность такой аппроксимации $b_a(y)$ даже при очень малых y невелика. Однако этого достаточно, чтобы определять величины скачков интересующих нас термодинамических функций.

При $y \gg 1$

$$b_a(y) = \Gamma(a+1)(e^{-y} + e^{-2y}/2^{a+1} + \dots).$$

Подобная же функция, имеющая отношение к распределению Ферми-Дирака,

$$f_a(y) = \int_0^\infty \frac{x^a dx}{e^{x+y} + 1}.$$

Для нее, очевидно, справедливо равенства

$$\frac{df_a(y)}{dy} = -a f_{a-1}(y), \quad \int_0^\infty f_a(y) dy = \frac{1}{a+1} f_{a+1}(0). \quad (446)$$

Легко найти, как связаны эти функции друг с другом:

$$f_a(y) = b_a(y) - 2^{-a} b_a(2y).$$

Для функций $b_a(y)$, $f_a(y)$ нет стандартных обозначений; функции, определяемые через ряды и отличающиеся, например, какими-либо множителями, вводятся в разных учебниках под разными именами.

Приведем здесь также формулы, полезные для расчётов с фермий-газом при низких температурах:

$$\int_0^\infty F(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^\mu F(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2 T^2}{6} F'(\mu),$$

где $F(\varepsilon)$ — гладкая функция, $f(\varepsilon) = 1/[\exp((\varepsilon - \mu)/T) + 1]$. Если к тому же $F(0) = 0$, то

$$\int_0^\infty F(\varepsilon) \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon = -F(\mu) - \frac{\pi^2 T^2}{6} F''(\mu),$$

(Вывод этих формул есть почти в каждом учебнике статистической физики.)

Список литературы

- [1] Ландау Л. Д., Либшиц Е. М. Статистическая физика. часть 1, М.: Наука, 1976.
- [2] Ландау Л. Д., Либшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982.
- [3] Ландау Л. Д., Либшиц Е. М. Физическая кинетика. М.: Наука, 1996.
- [4] Ландау Л. Д., Либшиц Е. М. Теория поля. М.: Наука, 1988.
- [5] Ландау Л. Д., Либшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1989.
- [6] Ландау Л. Д., Либшиц Е. М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
- [7] Ландау Л. Д., Либшиц Е. М. Теория упругости. М.: Наука, 1987.
- [8] Румер Ю. Б., Рывкин М. Ш. Термодинамика, статистическая физика и кинетика. М.: Наука, 1977.
- [9] Кубо Р. Статистическая механика. М.: Мир, 1967
- [10] Исхара А. Статистическая физика. М.: Мир, 1973.
- [11] Займан Дж. Принципы теории твёрдого тела. М.: Мир, 1974.
- [12] Г. Л. Коткин Г. Л. Лекции по статистической физике. М.; Ижевск: РХД, 2006
- [13] Сивухин Д. В. Общий курс физики. Т.2: Термодинамика и молекулярная физика. М.: Наука ,1979.
- [14] Козырев А. В., Ситников А. Г. Испарение сферической капли в газе среднего давления// УФН.2001. т. 171, № 7.
- [15] Гуревич Л. Э., Чернов А. Д. Происхождение галактик и звёзд. М.: Наука,1983.
- [16] Струков Б. А., Леванюк А. П., Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах. М.: Наука, 1983.

- [17] Абрикосов А. А. Основы теории металлов. М.: Наука, 1987
- [18] Леонтьевич М. А. Введение в термодинамику. М.: ГИТТЛ, 1950.
- [19] Енохович А. С. Краткий справочник по физике, М.: Высш. шк. 1976.
- [20] Волькенштейн М. В. Молекулярная биофизика М.: Наука, 1975.
- [21] Кронин Дж., Гринберг Д., Телегди В. Сборник задач по физике с решениями. М.: Атомиздат. 1975.
- [22] Коткин Г. Л., Сербо В. Г. Сборник задач по классической механике, М.; Ижевск: РХД, 2001.
- [23] Силин В. П. Введение в кинетическую теорию газов М.: Наука , 1971.
- [24] Хуанг Керзон. Статистическая механика. М.: Мир, 1966.
- [25] Коткин Г. Л., Теплоемкость подвешенного шарика//Сиб. хронограф, 1994. Сиб. физ. жур., № 1, с.64 .
- [26] Коткин Г. Л., Шары в пенале//Сиб. хронограф, 1995. Сиб. физ. жур., № 3, с.1.
- [27] Крылов Н. С. Работы по обоснованию статистической физики. М.: Изд-во АН СССР, 1950.
- [28] Синай Я. Г. Динамические системы с упругими отражениями. Эргодические свойства рассеивающих биллиардов // УМН. 1970. Т. 25, вып. 2.с.144—192.
- [29] Гальперин Г. А., Земляков А. Н., Математические биллиарды. М.: Наука, 1990. Б-чка Квант. Вып. 77.
- [30] Гальперин Г. А., Чернов Н. И., Биллиарды и хаос. М.: Знание, 1991 (Новое в жизни, науке, технике. Серия: Математика, кибернетика. № 5).
- [31] Крокстон К., Физика жидкого состояния. М.: Мир, 1978.
- [32] Израилев Ф. М., Коткин Г. Л., Фрумин Л. Л., Эйдельман С. И., Моделирование физических процессов. Лабораторный практикум. Новосибирск. НГУ, 1986.

- [33] Киттель Ч. Статистическая термодинамика. М.: Наука, 1977, гл.4.
- [34] Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р. Статистическая физика макромолекул, М.: Наука, 1989.
- [35] де Жен П. Идеи скейлинга в физике полимеров. М.: Мир, 1980.
- [36] Шапиро С., Тьюколски Черные дыры, белые карлики и нейтронные звезды, М.: Мир, 1985, ч.1,2.
- [37] Компанец А.С. ЖЭТФ, т.31, с.876, 1956.
- [38] Задачи по термодинамике и статистической физике, под ред. П.Ландсберга, М.: Мир, 1974.
- [39] Вайнберг С., Гравитация и космология. М.: Мир, 1975.
- [40] Новиков И.Д., Фролов В.П., Физика черных дыр. М.: Наука, 1986.
- [41] Торн К., Зурек В., Прайс, Тепловая атмосфера черных дыр. в кн. Черные дыры: мембранный подход. М.: Мир, 1988.
- [42] Барроуз А. Рождение нейтронных звезд и черных дыр. в сб. Физика за рубежом 89, сер. А. М.: Мир, 1989.
- [43] Хриплович И.Б. Общая теория относительности Новосибирск: РИЦ НГУ, 2000.
- [44] Орешкин П.Т. Физика полупроводников и диэлектриков. М.: Высшая школа, 1977.
- [45] Браут Р., Фазовые переходы. М.: Мир, 1967.
- [46] Левич В.Г., Введение в статистическую физику. М.: ГИТТЛ, 1954.
- [47] Ферми Э., Молекулы и кристаллы. М., Гос. изд. ИЛ: 1947.
- [48] Navez P., Bitouk D., Gajda M., Idziaszek Z., Rzazewski K. Phisical Review Letters, v.79, p. 1789 (1997).
- [49] Ликин Г., Квантовая механика. М.: Мир, 1977.
- [50] Анималу А. Квантовая теория кристаллических твердых тел. М.: Мир, 1981.
- [51] Фейнман Р. Статистическая механика. М.: Мир, 1978.