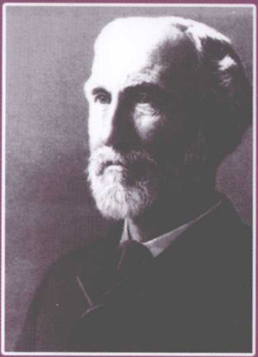
Problems in Statistical Mechanics



统计力学题谱

沈惠川　沈　励　编著

中国科学技术大学出版社

统计力学题谱

Problems in Statistical Mechanics

沈惠川 沈 励 编著

中国科学技术大学出版社

内 容 简 介

本书是为沈惠川所著的《统计力学》(中国科学技术大学出版社,2011)一书配套的题谱. 本书除对《统计力学》中全部 175 道习题进行详解外,还对 38 道"题外题"进行了精解. 每道习题和"题外题"的末尾都有"点题",也就是讨论和评论. 为了与《统计力学》一书相呼应,本书将原书中的 40 道"例题"除个别几道外作了全部收录. 另外,本书附录 B 中收录了 3 道关于 Darwin-Fowler 统计方面的习题,本书附录 C 中收录了 114 道关于热力学方面的习题.

本书以"系综理论"为主线,在平衡态统计力学中强调"配分函数"的核心地位. 全书共 6 章.

本书可作为大学本科物理类各专业及相关专业的教材,也可供研究人员作参考.

图书在版编目(CIP)数据

统计力学题谱/沈惠川,沈励编著. 一合肥:中国科学技术大学出版社,2012. 4
ISBN 978-7-312-02952-3

Ⅰ. 统… Ⅱ. ① 沈… ② 沈… Ⅲ. 统计力学—高等学校—题解 Ⅳ. O414.2-44

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2012) 第 041957 号

出版 中国科学技术大学出版社
地址:安徽省合肥市金寨路 96 号,230026
网址: http://press.ustc.edu.cn
印刷 安徽江淮印务有限责任公司
发行 中国科学技术大学出版社
经销 全国新华书店
开本 710 mm×960 mm 1/16
印张 22
字数 560 千
版次 2012 年 4 月第 1 版
印次 2012 年 4 月第 1 次印刷
定价 42.00 元

序

做题不仅仅是为了解答疑问，更是为了获取知识．将一道道例题和习题中的知识点串连起来，就可窥见学问的全貌（例如 S. Flügge 的《实用量子力学》和久保亮五（R. Kubo）的《热力学：包括习题和解答的高级课程》、《统计力学：包括习题和解答的高级课程》等书，虽然是一本本习题集，但同时又是一本本教科书）．有时候从一道习题的已知条件和最后解答联想开来，又可开发出一个新的研究领域[例如 Mayer 夫妇的《统计力学》一书中关于 Fermi-Dirac 积分（低温展开式）的计算就来自对一个小问题的认真探讨]．

路就在脚下，课题就在手中．

小处见大，于无声处听惊雷．

道理其实很简单．如果考证一下一道道例题和习题尤其是最基本的例题和习题的来源，就可以发现它们要么是当初物理学家研究问题时所做的计算之片段，要么是当初对这些“计算之片段”的结果所做的推演；这些最基本的例题和习题实际上就是最初的论文之底稿．当然，在研究问题之前，要对整个问题的物理方面和哲学、逻辑方面进行全面的检讨和思考；数学模型和计算过程只是这种“检讨和思考”的继续和具体化．

对一些初建的、尚不成熟的物理学科来说，更是如此．

所以对这些学科来说，一道道例题和习题尤其是最基本的例题和习题实际上是整个学科的投影．

以后发展起来的“成百上千”的例题和习题，慢慢脱离了最初的理论研究，而变成了具体应用，进而变成“练题”、“练脑”．

由解题来探索或深入探索，对于研究统计力学来说是再合适不过的．美籍华裔物理学家马上庚（S.-K. Ma）先生在其名著《统计力学》（中文版：环华出版事业公司，台北，1982；英文版：World Scientific Pub. Co. Pte Ltd.，Singapore，1985）一书的“序”中说过：“习题是内容中重要的一部分．不做习题，则不但应用技术学不到，基本观念也不会学到．”

统计力学以巨量的粒子系统作为研究对象，不同的专家学者以不同的视角所撰写的不同风格的统计力学教本也同样巨量（例如，华裔统计力学家所撰写的名著除了马上庚的外，还有吴大猷的，王竹溪的，黄克逊的，李政道的，田长霖的等等），而研

究统计力学本身这门学问则应以计算巨量的习题为手段.

统计,在巨量中发现一般.

统计力学中有3种理论,3种分布,3种系综.3种理论是Maxwell最可几理论,Darwin-Fowler平均值理论和Gibbs系综理论.3种分布是经典的Maxwell-Boltzmann分布,量子的Bose分布和Fermi分布.3种系综是微正则系综、正则系综和巨正则系综.经排列组合,似乎共有15类统计力学(Bose分布和Fermi分布属于巨正则系综).Maxwell最可几理论和Darwin-Fowler平均值理论相当于流体力学中的Lagrange描述,它们之间的区别只是方法不同而已;这两大种统计力学是将被淘汰和现已被多数人弃置不用的理论(实际上Darwin-Fowler平均值理论的统计力学现在已经被淘汰和弃置不用),因而只有物理史上的纪念意义,与流体力学中的Lagrange描述或塑性力学中的形变理论将逐渐被人遗忘一样.在3种系综中,微正则系综只适用于孤立系而与温度无关,物理意义不是太大,应用上不是太普遍也不方便,通常仅出现在教科书和题谱中;而且,由于微正则系综的配分函数D(实际上$D(\varepsilon)$就是状态数密度)和正则系综的配分函数Z以Laplace变换公式$Z=\int\exp(-\beta\varepsilon)D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon$相联系,因而对微正则系综可以少放在心上一些.经过如此筛选,剩下3种分布及正则和巨正则两种系综共6类统计力学是人们所关心的.又由于正则系综的配分函数Z和巨正则系综的配分函数$\tilde{Z}$以公式$\tilde{Z}=\exp(zZ)$相联系(式中$z=\exp(\beta\mu)$为易逸度),因而读者实际上只要牢记正则系综的3类统计力学即可.马上庚认为,统计力学的运算规则“可以说是Boltzmann的求熵公式,或可以说是某形象发生概率和$\exp(-\beta\varepsilon)$成正比”,此言说的正是正则系综,可谓说到了点子上.

分中有合,万变不离其宗.

统计力学中的统计方法是一个值得注意的课题.所谓统计方法,无非是“统计权重”,“状态数”或“状态数密度”这些统计学概念在物理学中的运用;在统计权重中,物理上还有“简并度”的概念(有些统计力学书中,将“简并度”归于“状态数”或“状态数密度”之中).所谓“统计学概念在物理学中的运用”,就是将经典力学或量子力学的某些结果引入统计学(具体来说是引入“统计权重”,“状态数”或“状态数密度”中).将这些东西搞熟了,统计力学也就不难了.所以李政道教授说:“我认为统计力学是理论物理中最完美的科目之一,因为它的基本假设是简单的,但它的应用却十分广泛.”

在热力学中,熵S和温度T是两个十分重要的物理量.热力学第二定律就是“熵定律”.在统计力学中,也有一个十分重要的物理量,那就是分布函数(或“系综数密

度”).Liouville 方程和 Boltzmann 方程就是专门用来研究分布函数的，目的是将分布函数与熵 S 联系起来.

根据统计力学中的统计方法，要计算粒子数 N、广义力 Y_k 和内能 E，只要利用分布函数便可.但仅有粒子数 N、广义力 Y_k 和内能 E，尚不能构成统计力学，因为有许多其他的热力学量还无法得到.只有在定义了熵 S 的计算规则后，才能完成统计力学对热力学量的统计要求.于是，著名的 Boltzmann“熵公式”应运而生.从这一意义上来说，没有 Boltzmann“熵公式”就没有统计(热)力学.

平衡态 Maxwell-Boltzmann 统计属于“Lagrange 描述”的统计力学“系统理论”(或被称为“近独立子系统理论”).同样属于“Lagrange 描述”的统计力学“系统理论”的还有 Darwin-Fowler 统计.前者是易于计算(利用“排列组合”)的“最可几理论”，而后者是不易计算(利用“复变函数”)的“平均值理论”.

“Lagrange 描述”的统计力学“系统理论”有一种奢望，就是企图借此来得到有关分子或原子的内部结构的知识.实践证明这不仅是不可能的，而且正是这种奢望限制了统计力学作为一种普遍研究手段的应用范围，使得这样的“系统理论”只能用来对理想气体进行统计计算而无法进行拓展.同时，这种“奢望”在统计力学的逻辑一致性方面也不够严谨.

本书附录 A 中的例题实际上都可以用“Euler 描述”的统计力学“系综理论”来求解(参阅例 2.11～例 2.14)，保留这些例题的目的是为了作一比较，以便让读者明白统计力学“系统理论”与统计力学“系综理论”在处理同一问题时的不同操作手法.

“系综”是一个出于“系统”而胜于“系统”的物理学概念.“系综”并非如某些教科书所说的仅仅是“一种数学抽象”、仅仅是“大量物理状态相同的系统的集合”，而是有其“物理实在”对应的“真实”.与流体动力学相仿，“系统”相当于流体中的“小单元”，而“系综”则相当于流体中的“控制区域”；在下一个时刻“控制区域”中的“小单元”并不是上一个时刻“控制区域”中的“小单元”；不管是在“不稳定流”中还是在“稳定流”中都一样，只不过在“稳定流”中的平衡属于“动平衡”而已.正是由于这一比喻，“系综理论”的统计力学就与流体动力学之间存在着千丝万缕的联系，并且可以用流体动力学来理解“系综理论”的统计力学；也正是由于这一比喻，“系综”与“系统”之间的关系犹如公孙龙的“马”与“白马”之间的关系.“系综”既是“系统”的哲学抽象，又是客观存在的物理具体.

正确的、有光辉前景的统计力学，必然是“系综理论”的.

多看例题、多做习题并举一反三，就可以逐渐弄明白为何“Euler 描述”的统计力学才是正确的和逻辑一致的.在一些涉及数学计算的小问题(例如何时可用“求和”、何时可用“积分”，例如“显关联”相互作用能否简化、略去)上，就可以看出“Lagrange

描述”的统计力学远远不及“Euler 描述”的统计力学，亦即，Maxwell-Boltzmann 的统计力学(还有 Darwin-Fowler 的统计力学)远远不及 Gibbs 的统计力学.

于是，在做题的过程中，不仅仅需要方法论，还需要有一点点世界观.

不仅仅需要数学，还需要一点点哲学.

在统计力学的系综理论中，最主要的目标就是计算物理问题的“配分函数”.“配分函数”是各种热力学量的“生成函数”，它在统计力学中的地位犹如“波函数”在量子力学中的地位.(研究“理想气体”的)经典统计力学中最一般的“配分函数”有两个，其一是表 2.8 中所谓“一般情况下”(能量 - 动量关系为 $\varepsilon = ap^l = a(p_1^2 + \cdots + p_s^2)^{\frac{l}{2}}$)的“配分函数”，其二是表 2.8 中所谓“相对论条件下”(能量 - 动量关系为 $\varepsilon = c\sqrt{p^2 + (mc)^2}$)的“配分函数”. 由于能量 - 动量关系为 $\varepsilon = c\sqrt{p^2 + (mc)^2}$ 的“相对论条件下”较少出现而且计算复杂，因而实际上需要记住的只有“一般情况下”的配分函数一个；其他类型的配分函数(除了能量 - 动量关系为 $\varepsilon = c\sqrt{p^2 + (mc)^2}$ 的“相对论条件下”外)都是它的特例.

统计力学千头万绪，归根到底只有一句话：求“配分函数”!

原则上说，只要知道了“一般情况下”的“配分函数”，则各类理想气体(相对论的或非相对论的，三维的或非三维的)的热力学量都可以被求得，其中一些简单的热力学“内能”更可以通过“一般情况下”的“能量均分原理”得到. 由“配分函数”求热力学量，在统计力学中是最起码的基本功，前提是必须对热力学知识有足够充分的掌握.

热力学知识尽管枯燥乏味，但却必不可少.

所有的统计力学，最后都要落实到热力学上去.

关于量子(分立)系统的“配分函数”的计算，由于只能使用“求和”而不是“积分”(“Laplace 变换”)，因而其算法没有一般的规律可循，要视具体问题而定；中间存在许多“物理陷阱”，要仔细识别. 物理概念是否清晰，就在这里了.

量子(分立)系统的状况，似乎部分回到了平衡态 Maxwell-Boltzmann 统计的“Lagrange 描述”.

在“巨正则系综”中，能够应用于实际问题的只有“Bose 巨配分函数的对数”和“Fermi 巨配分函数的对数”两种.“Bose 巨配分函数的对数”的成功应用是“固体”(Debye“声子”)和“光子气体”，“Fermi 巨配分函数的对数”的成功应用是“电子”.“Bose 巨配分函数的对数”在“光子气体”中的应用是最为出彩的，由它所得到的“Stefan-Boltzmann 公式”不仅验证了实验结果，而且证实了“狭义相对论”是完全正确的!

然而一般来说，“Bose 巨配分函数的对数”和“Fermi 巨配分函数的对数”的计算

都十分复杂,有时候只能作级数展开并进行近似处理;“Fermi 巨配分函数的对数”的低温近似之所以引出了如此之多的习题,就因为其“阶跃函数”的简单形式计算起来很方便,而其统计计算甚至比“Boltzmann 统计”更简易.“Bose 巨配分函数的对数”和“Fermi 巨配分函数的对数”的一般性推演及其在热力学量中的计算见例 3.9.

在 Bose 统计和 Fermi 统计的计算过程中,可以利用“等比级数”级数的求和公式;在“求和号”下,仍旧是“Boltzmann 统计”.

关于“非理想气体”,其“配分函数”实际上是理想气体的“配分函数”与所谓“位形积分”(即对应于“显关联”相互作用势能的“配分函数”)的乘积.一般来说,由于“显关联”相互作用势能的复杂性,“位形积分”的计算十分困难(除了个别例外).Mayer 夫妇的“集团展开”方法就是为了计算“位形积分”而发展起来的.由于“位形积分”的计算十分困难,因而相配套的习题也不多.关键是掌握其求解思路.

关于统计力学中尤其是平衡态统计力学中的例题和习题的分类,与每位作者的物理学立场有关.对于强调平衡态 Maxwell-Boltzmann 统计的作者来说,在这一主题下可以组织到一大批例题和习题;而对于强调平衡态 Gibbs 统计的作者来说,以上这一大批例题和习题完全可以纳入 Gibbs“系综理论”,只是解题的出发点有所不同而已.对前者来说,平衡态 Maxwell-Boltzmann 统计的例题和习题可以很多,但对后者来说,平衡态 Maxwell-Boltzmann 统计的例题和习题可以降至最少.

本书强调平衡态 Gibbs 统计,取后一立场.

这种“分类与立场有关”的事情,大概只有统计力学中(也许还有塑性力学中)才有.

本书中其他几章的例题和习题都比较少,具体的有关内容在每一章的“题外话”中都有介绍.“例题和习题都比较少”这一事实,说明了这些课题都还处在发展和不够完善的阶段,或者其中的计算过于复杂.

物理学教科书中,越是初级的、越是成熟的学科,例题和习题就越是多;越是高级的、越是前沿的学科,例题和习题就越是少.普通物理力学和电磁学中的例题和习题以“千”计(例如有一本书的书名就叫《电磁学千题解》),量子场论和量子统计中的例题和习题不足“百”道.普通物理热学中的例题和习题,不算数值计算的,就有几百道够你折腾;而热力学中的例题和习题,再多找出一道都难(每一道都有可能是一条定理)!

在本《题谱》中,成熟的“平衡态统计力学”方面的例题和习题就比较多,而不太成熟的“非平衡态统计力学”方面的例题和习题就比较少;在“平衡态统计力学”方面,各种“理想气体”的例题和习题就比较多,而“非理想气体”的例题和习题就比较少.

山至颠成尖，物以稀为贵.

学生做题，“多多益善”也许并不可取，没有必要也无可能，除非你将来准备出书或打算教书. 雷同的习题，挑一两道做做即可，尝尝味道（当然不是“浅尝辄止”）. 前提是必须治学要严，学艺要精. 对已经融会贯通的同学来说，做题只不过是牛刀小试，是看看自己的身手如何矫健. 对决心笨鸟先飞的同学来说，想必每道例题和习题都有它本身的机关窍门，若不进去走走，焉得虎子？

在自习室做题，总比去电脑房打游戏强.

搞些真刀真枪的工作，总比夸夸其谈好.

本书的作者曾经是、现在也仍然是学生.

我们都是 Gibbs，Uhlenbeck，Fowler 这些大师的学生的学生.

本《题谱》有两大特色：一是每道题末的“点题”，二是每章末的“题外题”.

“点题”，主要是对每一道习题的评论，从中引出的其他结果，间或还有一般性的介绍.

“题外题”，主要是对《统计力学》一书中未涉及问题的讨论. 这些问题，对往后的学习和研究或许是有用的；有些则是对以往知识的重点提示.

本《题谱》是与《统计力学》一书配套的. 因此大部分“例题”以“例题萃要”的形式进行罗列. 绝大多数“例题”都是《统计力学》一书中的重要结论和应用示范.

本《题谱》中“例题萃要”和“习题解答”的编号与《统计力学》一书完全相同，一一对应.

本《题谱》中另有“附录 B Darwin-Fowler 统计习题解答”和“附录 C 热力学习题解答”；两个附录中均无“题外话”和“点题”. 在第三个附录的开头本来有一大段“热力学内容简介”，它与另外一大段“流体动力学内容简介”原先都附录于《统计力学》一书；由于篇幅所限，这两段都舍去了，仅留下“热力学习题解答”.“热力学习题解答”中有不少习题是在其他各种习题集中找不到的.

符号问题是撰写每一本科技图书所面临的共同问题. 在照顾习惯用法的同时，应尽量使每一种符号在同一本书中不重复. 在一道题中不使用同一种符号表示不同的物理量，还比较容易做到；在一本书中要做到这一条就比较困难了. 统计力学涉及的学科门类较多，避免符号重复的问题必须在一开始就规划好.

在本《题谱》正文中，压强用大写的 P（为了避免与广义动量 p 混淆），内能用 E 表示；但是在“附录 C 热力学习题解答”中，压强用小写的 p，内能用大写的 U（mol 内能用小写的 u）表示. 其他物理量也尽量避免重复使用（例如 Hamiltonian 用 ε 表示，以避免与焓相混淆）.

本书绝大多数题解以及全部“点题”由沈惠川教授完成和撰写.

部分题解和计算机输入由沈励先生完成.

是为序.

沈惠川　沈励

于中国科学技术大学

2011 年元旦

目　　录

第 1 章　平衡态统计力学基础

1.1 题　外　话

统计力学(当然也包括“平衡态统计力学”)的基础，最主要的就是“系综理论”，其数学表示则是“Liouville 方程”及其通解；另外还有 Liouville 定理和“隐关联”的概念.

“系综”是一个出于“系统”而胜于“系统”的物理学概念.“系综”并非如某些教科书所说的仅仅是“一种数学抽象”、仅仅是“大量物理状态相同的系统的集合”，而是有其“物理实在”对应的“真实”.与流体动力学相仿，“系统”相当于流体中的“小单元”，而“系综”则相当于流体中的“控制区域”；在下一个时刻“控制区域”中的“小单元”并不是上一个时刻“控制区域”中的“小单元”；不管是在“不稳定流”中还是在“稳定流”中都一样，只不过在“稳定流”中的平衡属于“动平衡”而已.正是由于这一比喻，“系综理论”的统计力学就与流体动力学之间存在着千丝万缕的联系，并且可以用流体动力学来理解“系综理论”的统计力学；也正是由于这一比喻，“系综”与“系统”之间的关系犹如公孙龙的“马”与“白马”之间的关系.“系综”既是“系统”的哲学抽象，又是客观存在的物理具体.

“Liouville 方程”原本是一个极普通的数学方程，只是当它与“系综”的“数密度”相联系、相融合的时候，才显示出其无穷的魅力和深刻的物理内涵.“Liouville 方程”实际上是“Liouville 定理”的数学表示.“Liouville 方程”本身并不具有时间的“不可逆性”，然而若将“Liouville 方程”进行“展开”，接着在合适的地方进行“截断”，则即表现出时间的“不可逆性”.这就是第 5 章中由“Liouville 方程”导出“Boltzmann 方程”的基本思想.结合本章和第 5 章，就可得出“Liouville 方程是统帅平衡态统计力学和非平衡态统计力学的主导方程”的结论.当然，这一结论只有在“系综理论”的统计力学中才成立.

“Liouville 方程”的通解与经典 Hamilton 力学中的“化动量正则变换”或“化动能正则变换”有关.“Liouville 方程”的通解并不难求；通过求解“Liouville 方程”可以使人明白：通常的“Boltzmann 分布”只不过是“Liouville 方程”的一个“平凡解”(这一“平凡解”通常是由带有一定“约束条件”的“Lagrange 未定乘数法”得到的，而不是由一般性地求解“Liouville 方程”得到的)；“Liouville 方程”的通解中除了此“平凡解”因子外，必然还有另一个“与广义坐标和广义动量有关的”因子.

根据“Liouville 方程”的通解，可以容易地得到所谓“隐关联势”.由于“Liouville 方程是统帅平衡态统计力学和非平衡态统计力学的主导方程”，又由于“Liouville 方程”的通解中必然还有另一个“与广义坐标和广义动量有关的”因子，因而这个“隐关联势”是一般地存在的.“隐关联势”是统计力学中“系统”之间“关联度”的量度.这种“关联度”并不体现在“系统”的 Hamiltonian 表达式中，因而它被称为“隐关联”(而体现在“系统”的 Hamiltonian 表达式中的“关联度”，被称为“显关联”).

实际上,“隐关联”的存在,正是统计力学必然取“系综诠释”的理由;反过来,“系综理论”的统计力学,必然存在“隐关联”.“隐关联”的存在和“系综诠释”是充分必要的.

本章中的例题是关于“系综”的“数密度”的,而习题则是关于“Liouville 方程”的通解的;均不难.

在本章的“题外题”中,吸收了几道关于张量和分析力学的习题;这些习题很重要,而且在统计力学中(尤其是在基本概念的掌握和应用方面)也很有用处.统计力学中“相空间体积不变性”的证明要用到“正则不变性”和“Poisson 括号”的计算;如果对基础理论问题没有一个清晰的认识是不行的.

1.2 本章主题

1. Liouville 方程

(1) 通常形式

其一:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+[\varepsilon,\rho]=0$$

式中$[\varepsilon,\rho]=\frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k}\frac{\partial \rho}{\partial q_k}-\frac{\partial \varepsilon}{\partial q_k}\frac{\partial \rho}{\partial p_k}(k=1,2,\cdots,m)$.

其二:

$$\mathrm{i}\frac{\partial \rho}{\partial t}=\hat{L}\rho$$

式中 $\hat{L}$ 被称为“Liouville 算符”(用 Einstein 求和约定):

$$\hat{L}=-\mathrm{i}\frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k}\frac{\partial}{\partial q_k}+\mathrm{i}\frac{\partial \varepsilon}{\partial q_k}\frac{\partial}{\partial p_k}$$

(2) Liouville 方程的“全 Poisson 括号”形式

其一(将时间维作为第 $m+1$ 维位形):

$$[\varepsilon,\rho]=0\quad\begin{pmatrix}k=1,2,\cdots,m\\ \mu=1,2,\cdots,m+1\end{pmatrix}$$

式中$[\varepsilon,\rho]=\frac{\partial \varepsilon}{\partial p_\mu}\frac{\partial \rho}{\partial q_\mu}-\frac{\partial \varepsilon}{\partial q_\mu}\frac{\partial \rho}{\partial p_\mu}\quad(\mu=1,2,\cdots,m+1)$.

其二$\left(将对时间的导数\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}换成对“原时”的导数\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\right)$:

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}\tau}=\frac{\partial \varepsilon}{\partial p_\mu}\frac{\partial \rho}{\partial q_\mu}-\frac{\partial \varepsilon}{\partial q_\mu}\frac{\partial \rho}{\partial p_\mu}=[\varepsilon,\rho]=0$$

2. Liouville 定理

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t}=0$$

3. “化动量正则变换”和 Liouville 方程的精确解

“化动量正则变换”一般可被写成

$$\begin{cases} \tilde{p} = \dfrac{1}{2m}p^2 + V(q) \\ \tilde{q} = \dfrac{\partial W}{\partial \tilde{p}} = \sqrt{\dfrac{m}{2}}\displaystyle\int \dfrac{\mathrm{d}q}{\sqrt{\tilde{p} - V(q)}} \end{cases}$$

(参阅沈惠川《经典力学》第 3 章有关习题)有时候可将 $\tilde{p}$ 写成 p^*，$\tilde{q}$ 写成 q^*.

Liouville 方程的精确解的关键就是“化动量正则变换”.

4. 由 Liouville 方程得到的“隐关联势”

“隐关联势”：

$$\mathcal{Q}(q_k, p_k) = \frac{1}{\beta}\ln f = k_B T \ln f(q_k, p_k)$$

1.3 例题萃要*

【例 1.2】 已知:对于有耗散力的力学系统,正则方程为

$$\begin{cases} \dot{p}_k = -\dfrac{\partial \varepsilon}{\partial q_k} - \dfrac{\partial D}{\partial \dot{q}_k} \\ \dot{q}_k = \dfrac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} \end{cases} \quad (k = 1, \cdots, m)$$

式中 ε 为系统的不含时的 Hamiltonian，D 为 Rayleigh(Lord Rayleigh，即 J. W. Strutt，1842～1919)耗散函数.

求证:(1) “统计系综”的“数密度”ρ 满足

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = \rho\left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial p_k \partial p_l}\right)\left(\frac{\partial^2 D}{\partial \dot{q}_k \partial \dot{q}_l}\right)$$

(2) $\dfrac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}t} \leqslant 0$.

证:(1) 在相空间中,因为有

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} &= \frac{\partial \dot{p}_k}{\partial p_k} + \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial q} = \frac{\partial}{\partial p_k}\left(-\frac{\partial \varepsilon}{\partial q_k} - \frac{\partial D}{\partial \dot{q}_k}\right) + \frac{\partial}{\partial q_k}\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k}\right) \\ &= -\frac{\partial^2 D}{\partial p_k \partial \dot{q}_k} = -\frac{\partial^2 D}{\partial \dot{q}_k \partial \dot{q}_l}\left(\frac{\partial \dot{q}_l}{\partial p_k}\right) = -\frac{\partial^2 D}{\partial \dot{q}_k \partial \dot{q}_l}\left[\frac{\partial}{\partial p_k}\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial p_l}\right)\right] \\ &= -\left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial p_k \partial p_l}\right)\left(\frac{\partial^2 D}{\partial \dot{q}_k \partial \dot{q}_l}\right) \end{aligned}$$

* 本书所载例题、习题的序号、内容均与《统计力学》一书中对应,但并未载入全部题目.

所以,由连续性方程(1.26)式的第一式

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} + \rho\frac{\partial v_k}{\partial x_k} = 0$$

可得

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = \rho\left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial p_k \partial p_l}\right)\left(\frac{\partial^2 D}{\partial \dot{q}_k \partial \dot{q}_l}\right)$$

(2) 由于 ε 为系统的不含时的 Hamiltonian 而 Rayleigh 耗散函数是广义速度 $\dot{q}_k$ 的二次齐次函数,所以

$$\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}t} = \dot{q}_k\frac{\partial \varepsilon}{\partial q_k} + \dot{p}_k\frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial q_k}\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k}\right) + \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k}\left(-\frac{\partial \varepsilon}{\partial q_k} - \frac{\partial D}{\partial \dot{q}_k}\right)$$

$$= -\frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k}\frac{\partial D}{\partial \dot{q}_k} = -\dot{q}_k\frac{\partial D}{\partial \dot{q}_k} = -2D \leqslant 0$$

点题:本题向读者提醒了两点,即:

(1) 在有耗散函数存在时,$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} \neq 0$;

(2) 在有耗散函数存在时,$\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}t} \leqslant 0$.

1.4 习题解答

【题 1.1】 已知:中心力场问题中,质量为 m 的质点在指数势系统中运动,其 Hamiltonian 在"s 态近似"的假设下可写为

$$\varepsilon = \frac{1}{2m}p^2 - V_0\exp\left(-\frac{q}{a}\right)$$

式中 V_0 和 a 为常数.

求:它的"化动量正则变换".

解:设

$$p^* = \varepsilon^* = \varepsilon = \frac{1}{2m}p^2 - V_0\exp\left(-\frac{q}{a}\right)$$

则直接应用《经典力学》中的有关公式后得到它的经典对易子是

$$q^* = \frac{\partial W}{\partial p^*} = \sqrt{\frac{m}{2}}\int\frac{\mathrm{d}q}{\sqrt{p^* + V_0\exp\left(-\frac{q}{a}\right)}}$$

$$= a\sqrt{\frac{2m}{\frac{p^2}{2m} - V_0\exp\left(-\frac{q}{a}\right)}}\,\mathrm{artanh}\left[\sqrt{\frac{\frac{1}{2m}}{\frac{p^2}{2m} - V_0\exp\left(-\frac{q}{a}\right)}}\,p\right]$$

点题:"化动量正则变换"(以及"化动能正则变换")是精确求解 Liouville 方程的关键;由此(Liouville 方程的精确解)可知,Liouville 方程的"一般解"中必然存在"隐关联".注意本题中的势能是指数函数.

【题 1.2】 已知:中心力场问题中,质量为 m 的质点在 Morse 势系统中运动,其 Hamiltonian 在"s 态近似"的假设下可写为

$$\varepsilon = \frac{1}{2m}p^2 + V_0\left[1-\exp\left(-\frac{q}{a}\right)\right]^2 - V_0$$

式中 V_0 和 a 为常数.

求:它的"化动量正则变换".

解:设

$$p^* = \varepsilon^* = \varepsilon = \frac{1}{2m}p^2 + V_0\left[1-\exp\left(-\frac{q}{a}\right)\right]^2 - V_0$$

则直接应用《经典力学》中的有关公式后得到它的经典对易子是

$$q^* = \frac{\partial W}{\partial p^*} = \sqrt{\frac{m}{2}}\int \frac{\mathrm{d}q}{\sqrt{p^* - V_0\exp\left(-\frac{2q}{a}\right) + 2V_0\exp\left(-\frac{q}{a}\right)}}$$

$$= -a\sqrt{\frac{\frac{m}{2}}{\frac{p^2}{2m} + V_0\left[1-\exp\left(-\frac{q}{a}\right)\right]^2 - V_0}}\,\mathrm{artanh}\left[\frac{\sqrt{2m}}{p}\frac{\frac{p^2}{2m} + V_0\exp\left(-\frac{q}{a}\right)\left[\exp\left(-\frac{q}{a}\right)-1\right]}{\sqrt{\frac{p^2}{2m} + V_0\left[1-\exp\left(-\frac{q}{a}\right)\right]^2 - V_0}}\right]$$

点题:"化动量正则变换"(以及"化动能正则变换")是精确求解 Liouville 方程的关键;由此(Liouville 方程的精确解)可知,Liouville 方程的"一般解"中必然存在"隐关联". 注意本题中的势能是指数函数的二次式.

【题 1.3】 已知:中心力场问题中,质量为 m 的质点在 Hulthén 势系统中运动,其 Hamiltonian 在"s 态近似"的假设下可写为

$$\varepsilon = \frac{1}{2m}p^2 - V_0\frac{\exp\left(-\frac{q}{a}\right)}{1-\exp\left(-\frac{q}{a}\right)}$$

式中 V_0 和 a 为常数.

求:它的"化动量正则变换".

解:设

$$p^* = \varepsilon^* = \varepsilon = \frac{1}{2m}p^2 - V_0\frac{\exp\left(-\frac{q}{a}\right)}{1-\exp\left(-\frac{q}{a}\right)}$$

则直接应用《经典力学》中的有关公式后得到它的经典对易子是

$$q^* = \frac{\partial W}{\partial p^*} = a\sqrt{2m}\left[\frac{1}{\sqrt{\frac{p^2}{2m} - \frac{V_0\exp\left(-\frac{q}{a}\right)}{1-\exp\left(-\frac{q}{a}\right)}}}\mathrm{artanh}\left(\sqrt{\frac{\frac{1}{2m}}{\frac{p^2}{2m} - \frac{V_0\exp\left(-\frac{q}{a}\right)}{1-\exp\left(-\frac{q}{a}\right)}}}\,p\right)\right.$$