

МАКРОСИСТЕМЫ

The background features several large, overlapping, semi-transparent swirls in shades of purple, green, and blue. Scattered throughout are numerous small, yellow, triangular shapes, some pointing towards the center and others pointing outwards, creating a dynamic and abstract pattern.

Элементы
статистической
физики

Литература

- Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, том V
- Ричард Фейнман, *Статистическая механика*, курс лекций
- Киттель
- Л.А. Максимов, А.В. Михеенков, И.Я. Полищук, *Лекции по статистической физике* (сайт преподавателя)

ЭЛЕМЕНТЫ статистической физики

Кинетическая теория

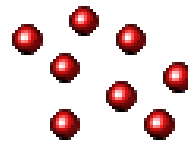
Средние значения

- Макроскопические системы, среды – это тела из *большого* числа частиц или поля с большим числом степеней свободы.
- Состояние среды известно всегда весьма приближённо
- Важное значение имеют средние значения физических величин.

Ансамбль – множество одинаковых систем, находящихся в одинаковых внешних условиях и одинаково приготовленных.

16.12.2013

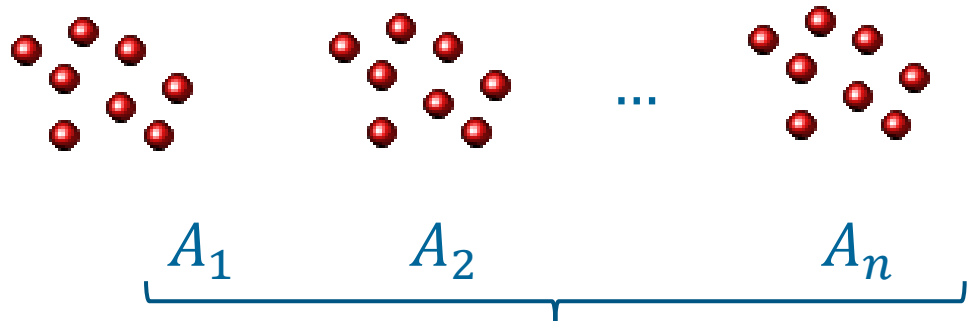
- Среднее значение физической величины A можно опр-ть 2мя способами:
- *Среднее по времени* $A \rightarrow \langle A \rangle_t$



$$\underbrace{A(t_1), A(t_2), \dots, A(t_n)}$$

$$\langle A \rangle_t$$

- *Среднее по ансамблю*
 $A \rightarrow \langle A \rangle$



$$\langle A \rangle = \frac{1}{n} (A_1 + A_2 + \dots + A_n) \quad 4$$

Эргодическая гипотеза

- *Среднее по времени* и *среднее по ансамблю* дают **одинаковый** результат для всех величин у всех макроскопических систем, находящихся в *равновесных* состояниях.
- Для *неравновесных* систем, состояние которых изменяется во времени, сохраняет смысл **только** *второй* способ усреднения.
- Везде далее под усреднением будем понимать среднее по ансамблю

Определения

$$\Delta A = A - \langle A \rangle$$

Флуктуация величины A .

$$\sigma_A = \sqrt{\langle (\Delta A)^2 \rangle}$$

Дисперсия

$$\langle \Delta A \Delta B \rangle$$

Корреляция величин A и B

Статистическая независимость и закон больших чисел

- Две физические величины *статистически независимы (некоррелированы)*, если

$$\langle \Delta A \Delta B \rangle = 0$$

- **Макроскопическая система** – любое тело природы, которое можно рассматривать как совокупность большого числа M ($M \gg 1$) статистически независимых подсистем.
- Мысленно разобьём макроскопическое однородное тело на большое число M *одинаковых статистически независимых* подсистем. Средние энергии $\langle E_i \rangle$ подсистем одинаковы, следовательно:
 - $\langle E_{tot} \rangle = \langle \sum_i^M E_i \rangle = M \langle E_1 \rangle$.

Дисперсия энергии системы

$$\sigma_{tot}^2 = \langle \Delta E_{tot}^2 \rangle = \left\langle \sum_i \Delta E_i \sum_j \Delta E_j \right\rangle = \sum_i \underbrace{\langle (\Delta E_i)^2 \rangle}_{\text{одинаковы}} + \sum_{i \neq j} \langle \Delta E_i \Delta E_j \rangle.$$

статистически независимы

Относительная флуктуация

$$\frac{\sigma_{tot}}{\bar{E}_{tot}} = \frac{\sigma_1}{\bar{E}_1 \sqrt{M}}$$

Мала при $M \gg 1$

$$\sigma_{tot}^2 = M \sigma_1^2$$

→ Закон больших чисел

Следствия:

- Однократное измерение любой физической величины, характеризующей макроскопическую систему, даёт результат, близкий к среднему значению этой величины
- Чтобы предсказать результат измерения любой физической величины макроскопической системы – достаточно вычислить её среднее значение.

Общий смысл закона больших чисел — совместное действие большого числа одинаковых и независимых случайных факторов приводит к результату,

в пределе не зависящему от случая.

Число состояний, плотность числа состояний

Термодинамической системой (ТС) будем называть любой воображаемый объём пространства, которому приписаны все термодинамические параметры (ТП) данного тела

По определению, **ТС всегда** занимает некоторый объём, соответственно, для того, чтобы **ТП могли** описывать состояние **всего** такого объёма –

ТС должна бесконечно медленно изменять своё состояние с течением времени, так, чтобы значение **любого ТП** для всех точек объёма **ТС было равно** (или очень близко) к его среднему значению по объёму **ТС**

Такие состояния **ТС называют равновесными термодинамическими состояниями – РТС**

Определение равновесного состояния в **статистическом** смысле будет дано несколько позже.

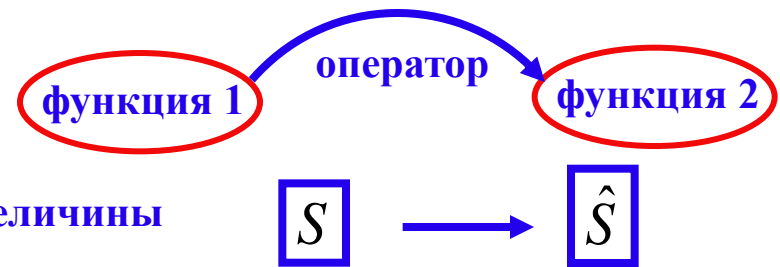
Основной постулат кв. мех.

В квантовой механике **все** динамические параметры *микрочастицы* **дискретны**

Одна из **основных задач** квантовой механики - определение **допустимых значений** физических величин (динамических параметров *микрочастицы*)

Операторы

Оператор - это **правило**, по которому **одной** функции сопоставляется **другая** функция



В квантовой механике принято **оператор** физической величины обозначать **той же буквой**, но со «шляпкой»

Основной постулат квантовой механики

Любой физической величине можно поставить в соответствие **линейный самосопряженный оператор** так, что **спектр собственных значений оператора совпадет со спектром допустимых значений физической величины**

Уравнения квантования

Используя правила сопоставления Неймана, мы сводим задачу об отыскании допустимых значений физической величины S к задаче отыскания собственных значений S оператора \hat{S}

(сопоставляемого физической величине) -

т.е. таких S , при которых уравнение

имеет решение

$$\hat{S}\Psi = s\Psi$$

уравнение
квантования

В квантовой механике для **каждой** физической величины существует **свое** уравнение квантования, вид которого определяется оператором, сопоставляемым физической величине

Уравнение Шредингера - одно из уравнений квантования - для оператора *полной механической энергии* \hat{H}

Если выполняется условие нормировки, то уравнение квантования имеет решение **He** при любых значениях S , а лишь при некоторых S_i , называемых собственными значениями оператора \hat{S}

Множество собственных значений $\{S_i\}$ называют спектром оператора \hat{S}

Соответствующие Ψ -функции - Ψ_i , называют собственными функциями оператора \hat{S}

Число состояний, плотность числа состояний

Равновесное состояние макроскопической системы полностью описывается термодинамическими величинами – аддитивными интегралами движения и функциями от них.

Рассмотрим однородную замкнутую систему: объём V и число частиц N – задано, ост-е инт-лы движения равны нулю ($\vec{p}, \vec{L}, \vec{\mu} \dots$). Тогда все ТП явля-ся функциями энергии: $T = T(E), p = p(E), \mu = \mu(E) \dots$

Одной из задач статистической физики является нахождение этих зависимостей.

Итак, в кв. мех. состояние системы м.б. описано ур. Шрёдингера:

$$\hat{H} \psi_{\alpha} = E_{\alpha} \psi_{\alpha}$$

При вычислении ТП возникают суммы вида

$$\sum_{\alpha} f(E_{\alpha})$$

Из определения дельта функции: $f(E_\alpha) = \int dE f(E) \delta(E - E_\alpha)$

Тогда:

$$\sum_{\alpha} f(E_{\alpha}) = \int dE f(E) \frac{d\Gamma}{dE}$$

Где обозначено:

$$\frac{d\Gamma}{dE} \equiv \sum_{\alpha} \delta(E - E_{\alpha})$$

Это определение


плотности состояний системы

Проинтегрировав плотность состояний, мы получим

$$\Gamma(E) = \int \sum_{\alpha} \delta(E - E_{\alpha}) = \sum_{\alpha} \theta(E - E_{\alpha})$$

полное число состояний в интервале от минимального значения до E .

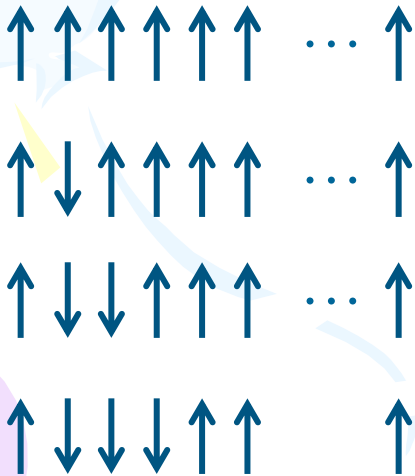
Очевидно: $\Delta\Gamma(E) = \frac{d\Gamma}{dE} \Delta E$


$$\Delta\Gamma(E) = \frac{d\Gamma}{dE} \Delta E$$

В макроскопической системе **число состояний $\Delta\Gamma(E)$** с энергией E очень **быстро растёт** с ростом энергии.

Соответственно, быстро растёт и число состояний $\Gamma(E)$ с энергией от нуля до E .

Пример – n спинов с $S=1/2$.



Энтропия

В статистической физике **энтропия** опр-ся как **логарифм числа состояний**:

$$\sigma(E) = \ln \Gamma(E)$$

Тогда, *число состояний* равно:

$$\Gamma(E) = e^{\sigma(E)}.$$

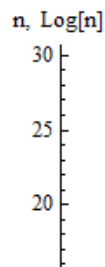
Для **макросистем** $\ln \Gamma(E) = \ln \Delta \Gamma(E)$ с большой точностью

$$\begin{aligned} \text{Действительно: } \ln \Delta \Gamma(E) &= \ln \left(\frac{d\Gamma(E)}{dE} \Delta E \right) = \ln \left(e^{\sigma(E)} \frac{d\sigma(E)}{dE} \Delta E \right) = \\ &= e^{\sigma(E)} + \ln \left(\frac{d\sigma(E)}{dE} \Delta E \right) \end{aligned}$$

Макроскопическая величина

$$N + \ln(N)$$

$$\ln \Gamma(E) = \ln \Delta \Gamma(E)$$



Равенство величин в логарифмическом приближении.

Свойства энтропии

Статистическая энтропия систем с большим числом степеней свободы монотонно **растёт** с *ростом энергии*.

Действительно:

$$E \uparrow \Rightarrow \Delta \Gamma(E) \uparrow \Rightarrow \sigma(E) \uparrow$$

Тогда:

1. $\sigma(E)|_{E=0} = \min;$

2. $\beta = \frac{d\sigma(E)}{dE} > 0;$

3. $\frac{d^2\sigma(E)}{dE^2} < 0;$

4. $\sigma_{AB}(E) = \sigma_A(E_A) + \sigma_B(E_B).$

энтропия:

1. минимальна в основном состоянии системы;
2. монотонно растёт с ростом энергии;
3. вторая производная по энергии отрицательна;
4. аддитивная величина.

Три примера. N спинов в магнитном поле.

Гамильтониан системы $H = -2\mu B \sum_{i=1}^N \left(s_i^z - \frac{1}{2} \right).$

Энергия 1го спина $-2\mu B s^z \quad (s^z = \pm \frac{1}{2})$

Если $N-M$ спинов в основном состоянии $-s^z = 1/2$
 M спинов в возбуждённом состоянии $-s^z = -1/2$

Энергия системы
 $E = M 2\mu B$

Число способов получить эн. E

Формула Стирлинга $N! \approx (N/e)^N$

$$\Delta\Gamma(E) = \frac{N!}{M!(N-M)!} \approx \left(\frac{N}{e}\right)^N \left(\frac{e}{M}\right)^M \left(\frac{e}{N-M}\right)^{N-M} = \frac{N^N}{M^M (N-M)^{N-M}}$$

Энтропия

$$\sigma(E) = -N(n \ln n + (1-n) \ln(1-n))$$

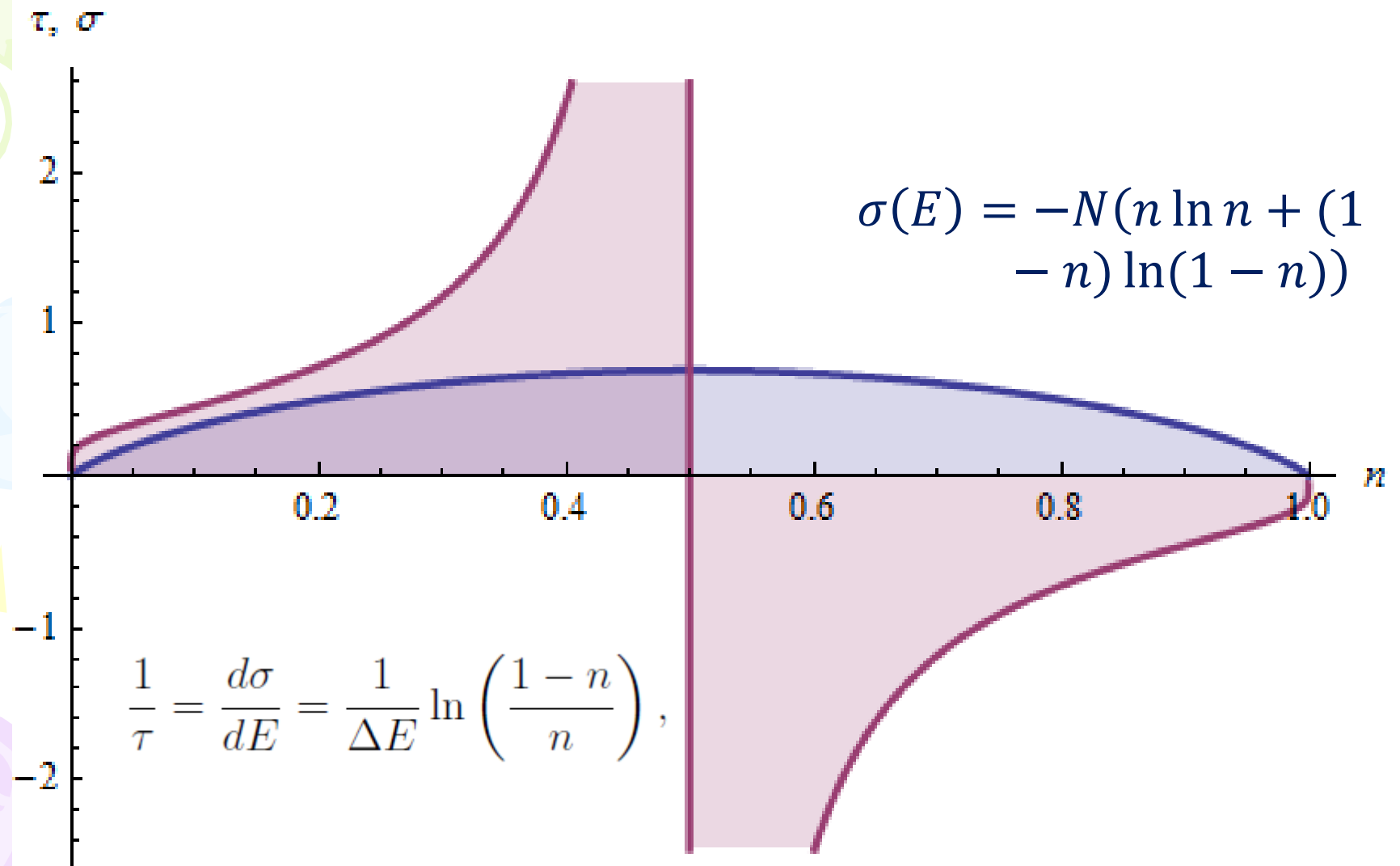
$$n = \frac{M}{N} = \frac{E}{(N\Delta E)}$$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{d\sigma}{dE} = \frac{1}{\Delta E} \ln \left(\frac{1-n}{n} \right),$$

Концентрация
 возбуждённых
 спинов

$$\frac{d^2\sigma}{dE^2} = -\frac{1}{N(\Delta E)^2 n(1-n)}.$$

График зависимости температуры и энтропии от n .



Три примера. N осцилляторов.

Система N **одинаковых**
осцилляторов

$$E = \Delta E \sum_{i=1}^N n_i, \quad \Delta E = \hbar\omega.$$

Число способов получить
энергию E

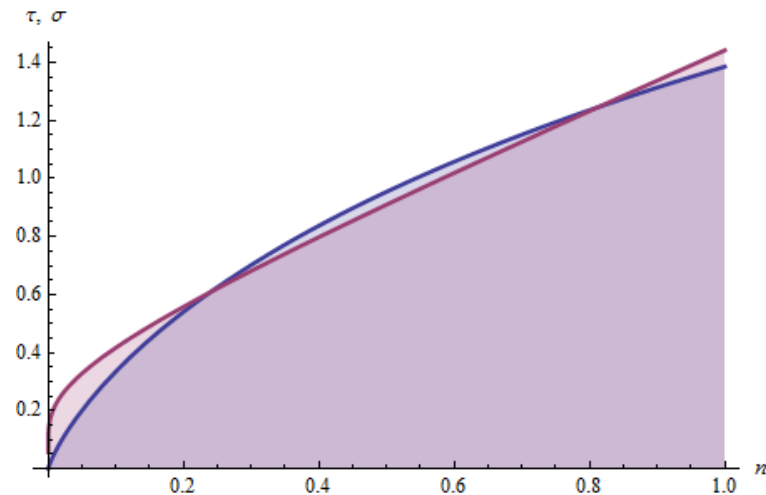
$$\frac{(N + M - 1)!}{(N - 1)!M!} \approx \frac{(N + M)^{N+M}}{N^N M^M}$$

Энтропия $\sigma = \ln \Delta \Gamma = N(-n \ln n + (1 + n) \ln(1 + n))$

$n = M/N = E/(N\Delta E)$ Среднее число возбуждений, приходящееся на
один осциллятор

Температура $\frac{d\sigma}{dE} = \frac{1}{\Delta E} \ln \left(\frac{1 + n}{n} \right)$

$$\frac{d^2\sigma}{dE^2} = -\frac{1}{N(\Delta E)^2 n(1 + n)}$$



Три примера. Идеальный газ.

Дано: N частиц, объём – V . Рассматриваем с точки зрения кл. физики. Состояние системы характеризуется точкой в $6N$ мерном пространстве: $\alpha = (\vec{r}_1, \vec{p}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_N,)$

Число точек в элементе $6N$ мерного фазового объёма

$$d\Gamma_\alpha = \frac{1}{N!} \prod_{i=1}^N \frac{d^3 r_i d^3 p_i}{(2\pi\hbar)^3}$$

Полное число состояний с энергией в интервале от 0 до E_α

$$\Gamma(E) = \int d\Gamma_\alpha \theta(E - E_\alpha)$$

$$E_\alpha = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}$$

$$\Gamma(E) = \frac{1}{N!} \int \prod_{i=1}^N \frac{d^3 r_i d^3 p_i}{(2\pi\hbar)^3} \theta \left(E - \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} \right)$$

Три примера. Идеальный газ.

Интегрирование по пространственным координатам даёт V

$$\Gamma(E) = \frac{1}{N!} \int \prod_{i=1}^N \frac{d^3 r_i d^3 p_i}{(2\pi\hbar)^3} \theta \left(E - \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} \right)$$

$$\Gamma(E) = \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \right)^N = \left(\frac{Ve}{N(2\pi\hbar)^3} \right)^N J_{3N}(E)$$

$$J_{3N}(E) = \int \prod_{i=1}^N d^3 p_i \theta \left(E - \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} \right) = \int d^{3N} p \theta \left(P^2 - \sum_{i=1}^N p_i^2 \right)$$

$E = P^2/2m$

Объём n -мерного шара

$$V_n(R) = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2} + 1)} R^n \approx \left(\frac{2e\pi R^2}{n} \right)^{\frac{n}{2}}$$

$$V_{3N}(P) = \left(\frac{2\pi e P^2}{3N} \right)^{3N/2}$$

$$\Gamma(E) = \left(\frac{Ve}{N(2\pi\hbar)^3} \right)^N \left(\frac{2\pi eP^2}{3N} \right)^{3N/2}$$

$$\sigma(E) = \ln\Gamma(E) = N \ln \left[\frac{Ve}{N(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{4\pi emE}{3N} \right)^{\frac{3}{2}} \right]$$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{d\sigma}{dE} = \frac{3N}{2E}, \quad \tau = \frac{2E}{3N}, \quad E = \frac{3}{2}NT$$

$$\frac{d^2\sigma}{dE^2} = -\frac{3N}{2E^2}$$

Для слабо возбуждённых состояний

$$\frac{d^2\sigma}{dE^2} \sim -1/E, \quad n \ll 1$$

Статистическая сумма

$$\Gamma(E) \rightarrow \sigma(E) \rightarrow T, \dots$$

Более удобная величина

трудность

$$Z(\beta) = \sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}}, \quad \beta > 0.$$

Статистическая сумма

$$\Gamma = \sum_{\alpha} \theta(E - E_{\alpha}),$$

$$Z(\beta) = \int_0^{\infty} e^{-\beta E_{\alpha}} d\Gamma = \int_0^{\infty} e^{-\beta E_{\alpha}} dE \frac{d\Gamma}{dE}$$

$$\frac{d\Gamma}{dE} = \sum_{\alpha} \delta(E - E_{\alpha})$$

$$\Gamma(E) = e^{\sigma(E)}.$$

$$Z(\beta) = \int_0^{\infty} e^{\sigma - \beta E} \frac{d\sigma}{dE} dE = \int_0^{\infty} e^f \frac{df}{dE} dE \quad f = \sigma - \beta E$$

$$f(E) = f_m + f'_m x + \frac{1}{2} f''_m x^2, \quad x = E - E_m$$

Точка E_m определяет максимум функции, если

$$f' = \frac{d\sigma}{dE} - \beta = 0,$$

$$f(E) = f_m - \frac{1}{2} |f''| x^2,$$

$$f'' = \frac{d^2\sigma}{dE^2} < 0.$$

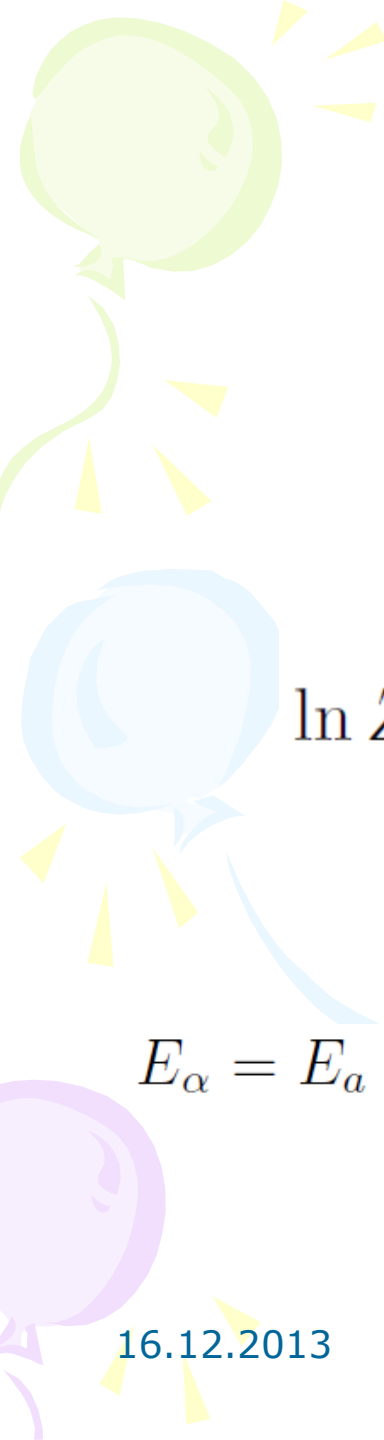
$$Z(\beta) = e^{f_m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d\sigma}{dE} e^{-\frac{1}{2}|f''|x^2},$$

$$|\sigma''| \sim N/E^2 \text{ или } 1/E, \rightarrow$$

$e^{-\frac{1}{2}|f''|x^2}$ имеет резкий максимум в точке E_m

с шириной $\Delta E = (\sigma'')^{-\frac{1}{2}} \ll E$

$$Z(\beta) = \beta e^{f_m} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}|f''|x^2}$$


$$Z(\beta) = \beta e^{f_m} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}|f''|x^2}$$

После интегрирования получаем

$$Z(\beta) = \beta e^{f_m} \sqrt{\frac{2\pi}{|f''|}}$$

$$\ln Z(\beta) = \sigma(E_m) - \beta E_m + \ln \left[\beta \sqrt{\frac{2\pi}{|\sigma''|}} \right]$$

$$\ln Z(\beta) = \sigma(E_m) - \beta E_m$$

$$E_\alpha = E_a + E_b \quad Z_{A,B}(\beta) = \sum_{a,b} e^{-\beta(E_a + E_b)} = Z_A(\beta) Z_B(\beta)$$

$$\ln Z_{A,B}(\beta) = \ln Z_A(\beta) + \ln Z_B(\beta)$$

$$\ln Z(\beta) = \sigma(E_m) - \beta E_m$$

$$T \ln Z(\beta) = T\sigma(E_m) - E_m$$

$$T \ln Z\left(\frac{1}{T}\right) = TS - E$$

$$\bar{F} = \bar{E} - TS$$

$$F = -T \ln Z\left(\frac{1}{T}\right) *$$

Это главная формула статистической физики. Она дает единый алгоритм вычисления всех термодинамических величин:

1. Вначале следует задать гамильтониан системы и решить квантовомеханическую задачу — найти вид спектра энергии E_α .
2. Зная энергетический спектр, следует вычислить статистическую сумму Z
3. После этого по формуле * определяем свободную энергию, производные от которой задают все остальные термодинамические величины.

Распределение Максвелла

Кинетическая теория – это учение о строении и свойствах макросистем, основанное на **статистических методах** исследования

Будем изучать **идеальный газ** – вычислим **относительное** количество частиц газа, имеющих скорости в заданном диапазоне скоростей

где N_0 - общее количество частиц, dN - элементарное количество частиц, имеющих скорости в элементарном диапазоне от u до $u+du$, $f(u)$ - **функция распределения** (частиц по скоростям)

Качественный вид функции $f(u)$ достаточно очевиден

количество частиц газа при $u = 0$ очевидно равно нулю

при $u \rightarrow \infty$ так же равно нулю

и, следовательно, имеет **максимум** при некотором $u = u_0$

Максвелл нашел вид функции распределения для **идеального газа**

при условии, что $u = v/v_B$ - **относительная скорость**,

M2

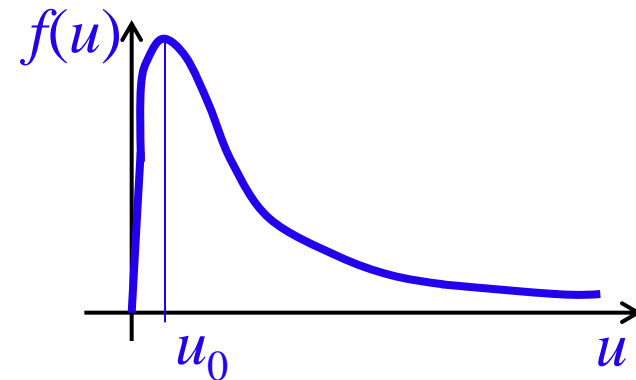
$$v_B = \sqrt{\frac{2RT}{\mu}}$$

16.12.2013

- **наиболее вероятная скорость** частиц идеального газа с

молярной массой μ при температуре T

$$\frac{dN}{N_0} = dn = f(u)du$$



$$f(u) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} e^{-u^2} u^2$$

M1

Распределение Максвелла

Функция распределения позволяет вычислять **средние значения** любых характеристик частиц идеального газа

$$\langle A(u) \rangle = \int_0^{\infty} A(u) f(u) du$$

$$\int_0^{\infty} x^{\alpha} e^{-x} dx = \Gamma(\alpha + 1)$$

При вычислениях средних значений по функции распределения Максвелла необходима формула, где **гамма-функция** $\Gamma(\alpha)$ имеет следующие свойства

$$\Gamma(1) = 1, \quad \Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}, \quad \Gamma(\alpha + 1) = \alpha\Gamma(\alpha), \quad \Gamma(n + 1) = n!$$

Найдем среднее значение **относительной скорости** u частиц газа - **среднюю скорость**

$$\langle u \rangle = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} u(u^2 e^{-u^2}) du = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} x e^{-x} dx = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Rightarrow \langle v \rangle = \langle u \rangle v_B = \frac{2}{\sqrt{\pi}} v_B$$

Найдем теперь среднее значение **кинетической энергии** \mathcal{E} частиц газа

$$\langle \mathcal{E} \rangle = \frac{m_{\mu}}{2} \langle v^2 \rangle = \frac{m_{\mu} v_B^2}{2} \langle u^2 \rangle = \frac{3m_{\mu} v_B^2}{4} = |R = kN_A| = \frac{3}{2} kT$$



Распределение энергии по степеням свободы

Итак, мы нашли, что средняя кинетическая энергия \mathcal{E} частиц идеального газа

$$\langle \mathcal{E} \rangle = \frac{3}{2} kT$$

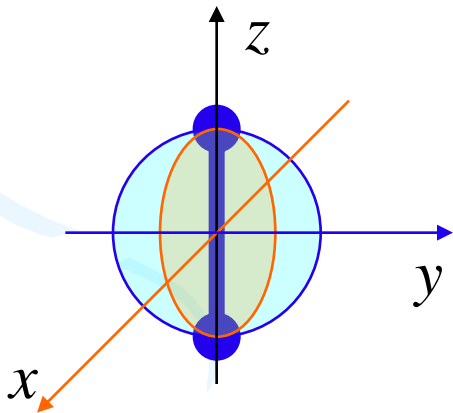
Числом степеней свободы любого физического объекта называют минимальное количество независимых координат, необходимых для описания движений этого объекта

Частицы идеального газа имеют 3 (три) степени свободы, следовательно, на каждую степень свободы приходится

$$\langle \mathcal{E}_i \rangle = \frac{1}{2} kT$$

M4

2-атомная молекула



остальные молекулы

$$i = 6 \Rightarrow \langle \mathcal{E} \rangle = \frac{6}{2} kT = 3kT$$

в общем случае

$$\langle \mathcal{E} \rangle = \frac{i}{2} kT$$

M5

$$i = 3 + 2 = 5 \Rightarrow \langle \mathcal{E} \rangle = \frac{5}{2} kT$$

Теплоемкость многоатомных газов

По определению, **внутренняя энергия газа** равна **сумме кинетических энергий** его молекул

Тогда, с учетом **формулы М5**, получаем

$$U = \sum_{j=1}^N \langle \mathcal{E}_i \rangle_j$$

$$U = N \langle \mathcal{E}_i \rangle = N \frac{i}{2} kT = \left| N = \frac{m}{\mu} N_A, kN_A = R \right| = \frac{i}{2} \frac{m}{\mu} RT$$

теплоемкость при постоянном объеме

$$(c_{\mu})_V = \frac{\mu}{m} \left(\frac{\delta Q}{dT} \right)_V = \left| \delta Q = dU \right| = \frac{\mu}{m} \left(\frac{\delta U}{dT} \right) = \frac{\mu}{m} \frac{i}{2} \frac{m}{\mu} R = \frac{i}{2} R$$

теплоемкость при постоянном давлении

$$(c_{\mu})_p = \frac{\mu}{m} \left(\frac{\delta Q}{dT} \right)_p = \left| (c_{\mu})_p + (c_{\mu})_V = R \right| = R - (c_{\mu})_V = \left(\frac{i}{2} + 1 \right) R$$

Распределение Максвелла для компонент импульса

Функция $M1$ описывает распределение частиц идеального газа по величинам скоростей этих частиц, однако скорость – это вектор, потому задача описания распределения частиц с учетом направления их движений имеет важное прикладное значение

Функцию распределения Максвелла $f(u)$ можно преобразовать к виду

$$f(u)du = \frac{1}{\sqrt{(2\pi mkT)^3}} e^{-\frac{p^2}{2mkT}} dp_x dp_y dp_z$$

где m - масса, p - импульс
и p_x, p_y, p_z - компоненты
импульса частиц газа

Тогда, очевидно, можно ввести функцию
(здесь $i = x, y, z$),
описывающую распределение частиц
идеального газа по компонентам импульса

$$f(p_i) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi mkT)}} e^{-\frac{p_i^2}{2mkT}}$$

M6

С помощью этой функции элементарное количество частиц, имеющих компоненты импульса в элементарном диапазоне от p_i до p_i+dp_i , принимает вид

$$dn = f(p_x)f(p_y)f(p_z)dp_x dp_y dp_z$$

M7

Функция M6 удовлетворяет условию нормировки

$$\int dn = n_0$$

где n_0 – концентрация
частиц газа

Распределение Больцмана

Будем изучать идеальный газ, находящийся в потенциальном поле $U(\mathbf{r})$, – вычислим **элементарное** количество частиц газа $dn(\mathbf{r})$, находящихся в **элементарном** объеме dV

Функция распределения Больцмана $f(\mathbf{r})$ имеет вид, где T - температура газа (при условии, что $T = const$)
Таким образом

B1

$$dn(\vec{r}) = Ce^{-U(\vec{r})/kT} dV$$

константа C определяется из нормировки

В частности, для концентрации частиц идеального газа в окрестности точки с радиус-вектором \mathbf{r} получим где n_0 - концентрация частиц на **эквипотенциальной поверхности** $U(\mathbf{r}) = 0$

Еще одним важным примером распределения Больцмана является **барометрическая формула**, описывающая зависимость **плотности атмосферы** от высоты (например, **вблизи от поверхности Земли**)

$$\rho = \rho_0 e^{-mgh/kT}$$

B2

Здесь $\rho = m dn/dV$ – плотность атмосферы на высоте h от горизонтали, на которой плотность равна ρ_0 , m - масса молекул атмосферы

$$dn = f(\vec{r})dV$$

$$f(\vec{r}) = Ce^{-U(\vec{r})/kT}$$

$$\int dn = n_0 \quad \text{где } n_0 - \text{концентрация частиц газа}$$

$$n(\vec{r}) = n_0 e^{-U(\vec{r})/kT}$$

Распределение Максвелла-Больцмана

Мы получили распределение Максвелла – формулы М6-М7

позволяющее вычислить элементарное количество частиц идеального газа, имеющих компоненты импульса в элементарном диапазоне от p_i до p_i+dp_i

и распределение Больцмана – формула В1

позволяющее вычислить элементарное количество частиц идеального газа $dn(\vec{r})$, находящихся в элементарном объеме dV в потенциальном поле $U(\vec{r})$

Объединяя эти распределения, получим распределение Максвелла-Больцмана

$$dn(\vec{r}) = C e^{-\frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) / kT} dp_x dp_y dp_z dx dy dz = C e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} d\Gamma$$

В3

позволяющее вычислить элементарное количество частиц идеального газа, находящихся в элементарном объеме dV в потенциальном поле $U(\vec{r})$ и имеющих компоненты импульса в элементарном диапазоне от p_i до p_i+dp_i , ε - полная энергия частиц

В распределении В3 величина $d\Gamma = dp_x dp_y dp_z dx dy dz$ – элемент фазового объема – элементарный объем 6-мерного пространства

ЭЛЕМЕНТЫ статистической физики

Элементы квантовой
статистики

Бозоны и фермионы

В квантовой статистике *частицы* идеального газа разделяют на два вида – **БОЗОНЫ** и **фермионы**

Бозоны

частицы **полностью**
эквивалентные между собой

Фермионы

частицы, подчиняющиеся
принципу Паули

В квантовой статистике *считают*, что *частицы* идеального газа находятся в **фазовом пространстве** (μ -пространстве), **минимальный** объем которого называют **ячейкой μ -пространства**

$$d\Gamma_{\mu} = (dx dy dz) (dp_x dp_y dp_z)$$

Принцип Паули

В каждой ячейке μ -пространства может находиться **не более 1 (одного) фермиона**

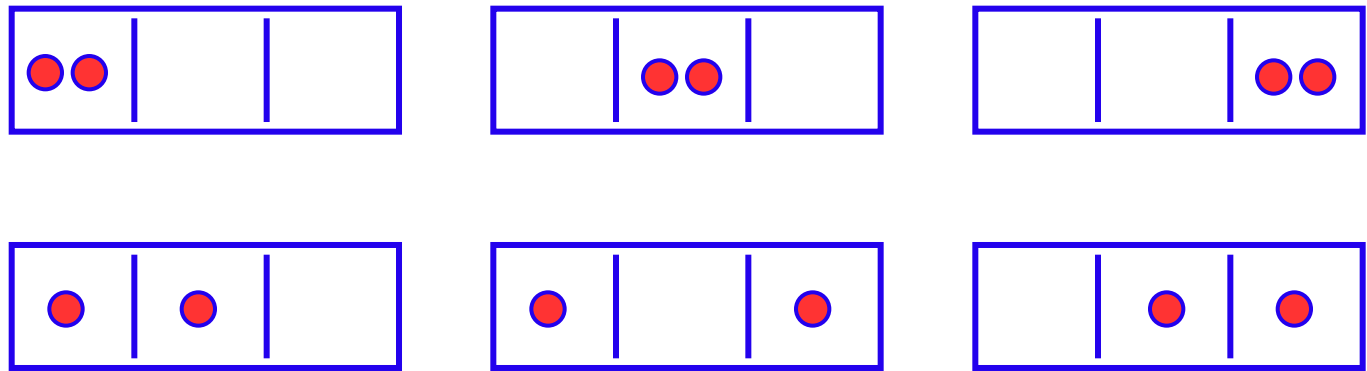
Соответственно, в каждой ячейке μ -пространства может находиться **любое количество бозонов**

Основная задача квантовой статистики – построение **функции распределения** *частиц по возможным состояниям* и нахождение **средних значений** физических величин, характеризующих *частицы в этих состояниях*

Бозоны и фермионы

Основные **различия** квантовых статистик для бозонов и фермионов можно понять на примере простейшей задачи квантовой статистики – размещение **двух** частиц по **трем** ячейкам пространства

Бозоны



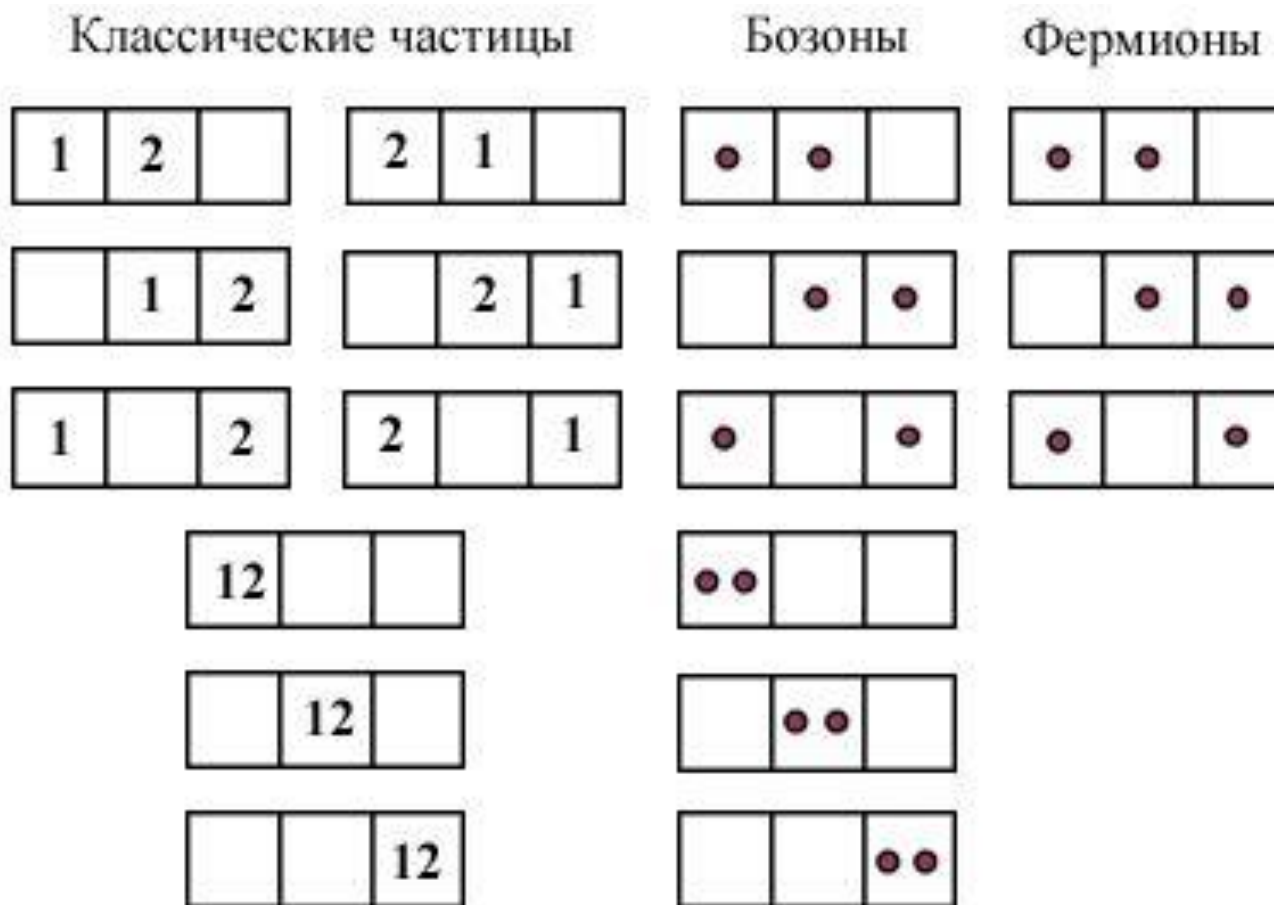
Итого – **6** вариантов

Фермионы



Итого – **3** варианта

Различие в распределении классических и квантовых частиц



Распределение Бозе-Эйнштейна

Рассмотрим теперь подробнее **БОЗОНЫ** - обозначим W_i - число **различных способов**, которыми можно разместить N_i частиц (находящихся в **состоянии** с номером i) в g_i ячейках

Очевидно $N_i!$ — число перестановок частиц (не дающих **новых способов распределения по ячейкам** – бозоны **неразличимы**), $(g_i - 1)!$ - число перестановок «перегородок» (между ячейками) и, следовательно

$$W_i = \frac{(N_i + g_i - 1)!}{N_i!(g_i - 1)!}$$

Тогда число W способов распределения частиц по **различным состояниям**, так, чтобы в 1-м состоянии было N_1 частиц, во втором – N_2 частиц и т.д.

$$W = W_1 \cdot W_2 \cdot W_3 \cdots W_N = \prod_{i=1}^N \frac{(N_i + g_i - 1)!}{N_i!(g_i - 1)!}$$

E1

Формула **E1** является **основной формулой статистики бозонов**

Величину W называют **термодинамической вероятностью** (статистический вес)

Пример

Проиллюстрируем полученный результат на следующем примере. Рассмотрим возможные распределения трех частиц по трем ячейкам.

Всего таких распределений 10 .

Точно такой же результат дает

$$W_i = \frac{(N_i + g_i - 1)!}{N_i!(g_i - 1)!}$$

Нас интересует распределение, которое может быть реализовано наибольшим числом способов, т.е. распределение, для которого статистический вес максимален. Таким образом, нужно найти максимум выражения **E1**. При этом следует иметь в виду, что полное число частиц системы $N = \sum_i N_i$ и полная энергия системы $E = \sum_i N_i E_i$

• • •		
	• • •	
		• • •
• •	•	
• •		•
	• •	•
	•	• •
•	• •	
•		• •
•	•	•

Распределение Бозе-Эйнштейна

С помощью **E1** несложно найти **наиболее вероятное** количество частиц в каждом состоянии

распределение **Бозе-Эйнштейна**

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\text{Exp}\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) - 1} \quad \boxed{E2}$$

где T – абсолютная температура и μ – химический потенциал **ТС** $\mu = \frac{1}{N_A} \left(\frac{dU}{dN} \right)_{S,U=const}$

k – **постоянная Больцмана** $k = 1,380650 \times 10^{-23}$ Дж/К

Для системы бозонов с **переменным** числом частиц $\mu = 0$ и формула **E2** принимает вид

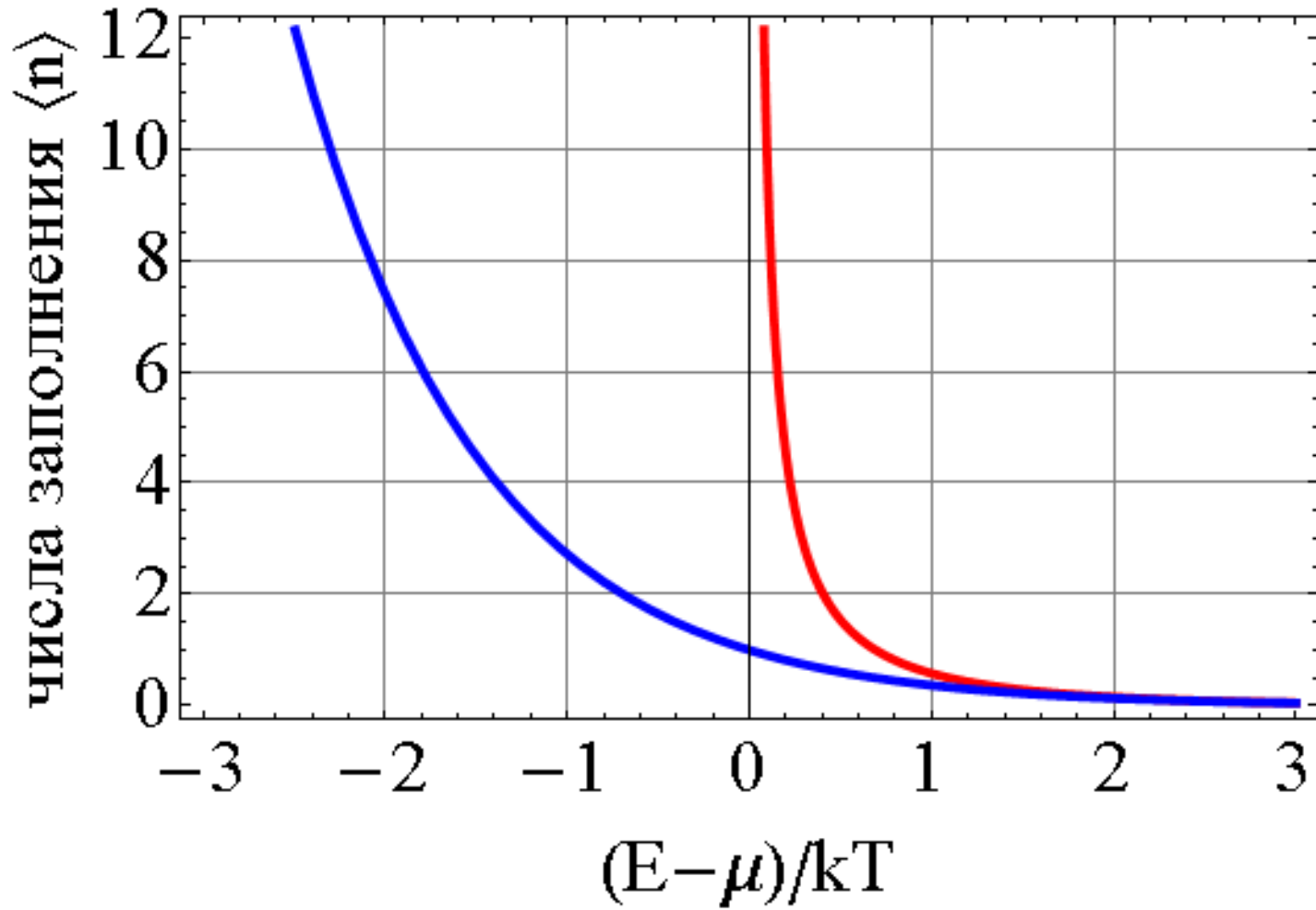
$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{E/kT} - 1} \quad \boxed{E3}$$

По постулату **Больцмана** энтропия **ТС** равна

$$S = k \ln W \quad \boxed{E4}$$

Распределение
Больцмана

Распределение
Бозе-Эйнштейна



Распределение Ферми-Дирака

Рассмотрим теперь подробнее **фермионы** - обозначим W_i - число **различных способов**, которыми можно разместить N_i частиц (находящихся в **состоянии с номером i**) в g_i ячеек

Очевидно $N_i!$ — число перестановок **занятых** ячеек,

$(g_i - N_i)!$ - число перестановок «пустых» ячеек,

$g_i!$ - число перестановок **всех** ячеек и, следовательно

$$W_i = \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!}$$

Тогда число W способов распределения частиц по **различным состояниям**, так, чтобы в 1-м состоянии было N_1 частиц, во втором – N_2 частиц и т.д.

$$W = W_1 \cdot W_2 \cdot W_3 \dots W_N = \prod_{i=1}^N \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!}$$

E5

формула **E5** является **основной формулой статистики фермионов**

Величину W называют **термодинамической вероятностью**

16.12.2013

Распределение Ферми-Дирака

С помощью E5 несложно найти **наиболее вероятное** количество частиц в каждом состоянии

распределение Ферми-Дирака

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\text{Exp}\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}$$

E6

где T – абсолютная температура и $E_F \equiv \mu$ – энергия Ферми (химический потенциал ТС)

k – постоянная Больцмана $k = 1,380650 \times 10^{-23}$ Дж/К

Энергия Ферми **всегда** положительна и является **медленно** меняющейся функцией температуры

Соответственно, **числа заполнения энергетических уровней** для фермионов $\langle n \rangle < 1$

Распределение Ферми-Дирака

Распределение Больцмана

