11.02.2013

II семестр

Статистическая физика

Статистические методы позволяют изучать сложную систему из микроскопических частиц.

Если сложная система подвергается воздействию, как целое, такие эффекты называются коллективными. Если сложная система - большие подсистемы.

q_1, q_2 - подсистемы

Если подсистемы не, сильно зависят друг от друга, то можно рассматривать и отдельно.

$(3N-1)$ подсистем N-частиц

$(3N-1)$ подсистем

Почему мы ещё с самой простой системой не справились? Почему? - Даже микроскопич. описание $N \sim 10^{23}$

Мы можем написать уравнения движения для каждой частицы

N - число частиц

$$q = \{q_1, \dots, q_{3N}\}; \quad p = \{p_1, \dots, p_{3N}\}$$

$$H(q,p) = K(p) + U(q)$$

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

$6N = 2n \to n = 3N$ (кол-во степеней свободы)

$\{q_{i0}\}$ $\{p_{i0}\}$

$$\begin{cases} q_i = q_i(q_0; p_0; t) \\ p_i = p_i(q_0; p_0; t) \end{cases} \Rightarrow$$ описывает микроскопич. состояние системы

* Задача стат. физики *

Но возникают проблемы как с начально микроскопич. описанием, так и масштаб.

Если хотим?

Вводим ф-ю стат. системы

$G(p, q)$ → отрыв дискретн. случая

$$G_{изм} = \lim_{t \to \infty} \frac{1}{t} \int_0^t G(q(p_0, q_0, \tau), p(p_0, q_0, \tau))\, d\tau$$

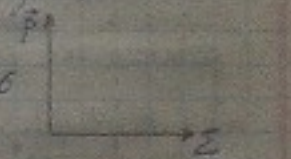
- Микроскопич. параметры не существенны в масштабах длительности
- Больцман, чтобы исключить → микроскопич. параметры ввёл понятие вероятности, а дальше Гиббс: ввёл понятие ансамбля и показал, что средние по ансамблю и по времени совпадают между собой

$$\overline{G}_{изм} = \int W(p,q)\, G(p,q)\, dp\, dq \qquad \overline{G} = \overline{G}$$

Больцман описывал ид. газ, частицы не взаимод. м/у собой и хар. N

N $\sum_i$ $\vec{V}_i$ $\vec{p}_i = m\vec{V}_i$

У нас $6^{ти}$ мерное пр-во $\Rightarrow$ dim $\mu = 6$



посчитаем, сколько число частиц попадает в отдельный объём.

$$dN(\vec{r}, p, t) = f(\vec{r}, \vec{p}, t)\, d\vec{p}\, d\vec{r}$$

$$N = \int f(\vec{r}, \vec{p}, t)\, d\vec{p}\, d\vec{r}$$

$$W(\Sigma, \vec{p}, t)\, d\vec{r}\, d\vec{p} = \frac{f(\Sigma, p, t)}{N}\, d\vec{p}\, d\vec{r}$$ - вероятность

А дальше хотим найти среднюю скорость

Если хотим найти микроскопич. описание нужно всё знать

$$w(x) = \frac{1}{\Omega(E)} \int \Omega_2(y)\, dQ^{(1)}$$

$$= \frac{1}{\Omega(E)} \int \Omega_2\left(E - H_1(x) - U_1(Q^{(1)})\right) dQ^{(1)} =$$

$$= \frac{3N_2}{2} \cdot \frac{1}{\Omega(E)} \int \left(E - H_1(x) - U_1(Q^{(1)})\right)^{\frac{3N_2}{2}} dQ^{(1)} =$$

$$= \frac{3N_2 a}{2\,\Omega(E)} \left(E - H_1(x)\right)^{\frac{3N_2}{2}} \int_{(Q^{(1)})} \left[1 - \frac{U_1(Q^{(1)})}{E - H_1(x)}\right]^{\frac{3N_2}{2}} dQ^{(1)} =$$

$N_2 \gg 1$

$$= \underbrace{\frac{Ma}{\Omega(E)} E^{-M}}_{B(E,M)} \left(1 - \frac{H_1(x)}{E}\right)^{M} dQ^{(1)} =$$

$M = \frac{3}{2} N_2$

$$= B(E,M) \left(1 - \frac{H_1(x)}{M\theta}\right)^{M} \int_{(Q^{(1)})} \left(1 - \frac{U_1(Q^{(1)})}{E - H_1(x)}\right)^{M} dQ^{(1)} =$$

$$\lim_{N \to \infty} \frac{E}{N} = \lim_{N_2 \to \infty} \frac{E}{N_2} = \frac{3}{2}\theta$$

$$M = \frac{3}{2} N_2 \sim \frac{E}{\theta} \to E = M\theta$$

$H_2(x) \ll E$

Введем величину:

$$B(E,M) = b(E,M) \int_{(Q^{(1)})} \left(1 - \frac{U_1}{M\theta}\right)^{M} dQ^{(1)}$$

$$= B(E,M) \left(1 - \frac{H_1(x)}{M\theta}\right)^{M} = \mathcal{Z}(\theta)\, e^{-\frac{H_1(x)}{\theta}}$$

при $M \to \infty$ → exp

$$w(x) = \mathcal{Z}(\theta)\, e^{-H_1(x)/\theta}$$

Введем $\mathcal{Z}(\theta) = e^{\frac{F(\theta,a)}{\theta}}$, а вывести карам.

$$w(x) = \exp\left[F(\theta,a) - H(x,a)/\theta\right]$$

→ канонич. распределение Гиббса

Из условия нормировки плотности вероятности найдем F

$$\int_{(\Gamma)} w(x)\, dx = 1$$

$$e^{\frac{F(\theta,a)}{\theta}} \int_{(\Gamma)} e^{-\frac{H(x,a)}{\theta}} dx = 1$$

$$\mathcal{Z}(\theta,a) = \int_{(\Gamma)} e^{-\frac{H(x,a)}{\theta}} dx$$ – стат. интеграл (нужно знать гамильт.)

$\theta = kT$

$$F = -\theta \ln \mathcal{Z}(\theta,a)$$

свободная эн. Гельмгольца

→ абс. минимум ф. в терм. в энергетич. единицах

$$dF = -S\,dT - \bar{A}\,da \qquad S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_a; \quad \bar{A} = -\left(\frac{\partial F}{\partial a}\right)_T$$

$$G_{мик} = \int G(p,q)\, e^{\frac{E - H(p,q)}{\theta}} dp\, dq$$

В каноническом распределении работаем уже в микроканонич., т.к. Γ-ф. – своя, ф

Термодинам. интерпретация парам-в, опред-х каноник. распределение.

Как определим температуру? – внутр. ф. системы системы, Фаар. но и ф. равновесия, Фиксированный множителем $dS = \left(\frac{1}{T}\right)\delta Q = \frac{dU - \delta W}{T}$

① $\theta_1 = \theta_2 \Rightarrow$ нет обмена энергией

$\theta_1 \neq \theta_2 \Rightarrow$ обмен энергией

Σ_1 $\quad \mathcal{D}_1(x_1) = \exp\left[\frac{F_1(\theta_1,a) - H_1(x_1,a)}{\theta_1}\right]$

Σ_2 $\quad \mathcal{D}_2(x_2) = \exp\left[\frac{F_2(\theta_2,a) - H_2(x_2,a)}{\theta_2}\right]$

$\boxed{1}$ $\boxed{2}$ $w_1(x_1)\cdot w_2(x_2) = e^{\frac{\bar{F}_1}{\theta_1}+\frac{\bar{F}_2}{\theta_2}}\, e^{\frac{H_1(x_1)}{\theta_1}+\frac{H_2(x_2)}{\theta_2}}$

$$w(x_1, x_2) = e^{\frac{\bar{F}_1}{\theta_1}+\frac{\bar{F}_2}{\theta_2}}\, e^{\frac{H_1(x_1)}{\theta_1}+\frac{H_2(x_2)}{\theta_2}+\tilde{H}_{12}(x_1(x_2, c))\left(\frac{1}{\theta_1}-\frac{1}{\theta_2}\right)}$$

$\tilde{H}_{12}$ — функция H

② $dS = \frac{\delta Q}{T} = \frac{dU - \delta W}{T} = \frac{dU - \bar{\mathcal{A}}\,da}{T}$

$$\frac{\partial}{\partial\theta}\Big|^{1} \quad \frac{\partial}{\partial a}\Big|^{2} \quad \boxed{e^{\frac{F(\theta,a)}{\theta}}\int_{(\Gamma)} e^{-\frac{H(x,a)}{\theta}}\,dx = 1}$$

1. $\frac{1}{\theta}\int_{(\Gamma)} e^{\frac{F(\theta,a)-H(x,a)}{\theta}}\left(\frac{\partial F(\theta,a)}{\partial a} - \frac{\partial H(x,a)}{\partial a}\right)dx = 0$

$$\frac{\partial F(\theta,a)}{\partial a} - \int \frac{\partial H(x,a)}{\partial a}\, e^{\frac{F-H}{\theta}}\,dx = 0$$

$$\bar{\mathcal{A}} = -\int_{(\Gamma)} \frac{\partial H}{\partial a}\, e^{\frac{F-H}{\theta}}\,dx$$

$$\frac{\partial F(\theta,a)}{\partial a} = -\bar{\mathcal{A}}$$

2. $\int_{(\Gamma)} e^{\frac{F(\theta,a)-H(x,a)}{\theta}}\left[-\frac{1}{\theta^2}(F-H) + \frac{1}{\theta}\frac{\partial F(\theta,a)}{\partial\theta}\right]dx = 0$

$$\left(-\frac{1}{\theta}F + \frac{\partial F}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\theta}\bar{H} = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial\theta}\left(-\frac{F}{\theta}\right) = \bar{H}$$

ур. Гиббса-Гельмгольца $\Rightarrow$ $\Rightarrow$ F — своб. энергия

$$\bar{H} = F - \frac{\partial F}{\partial\theta}\theta$$

$$\cancel{d\left(-\frac{F(\theta,a)}{\theta}\right) = \left(\frac{F}{\theta^2} - \frac{1}{\theta}\frac{\partial F}{\partial\theta}\right)d\theta - \frac{1}{\theta}\frac{\partial F(\theta,a)}{\partial a}\,da =}$$

$$\cancel{-\frac{1}{\theta}\bar{\mathcal{A}}\,da + \frac{1}{\theta}d\bar{U} = \frac{1}{\theta}(d\bar{U} - \bar{\mathcal{A}}\,da)}$$

$$\boxed{\bar{H} = U = F - \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_a T}$$

$$\boxed{\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_a = -S}$$

$$\left[\begin{aligned} & d\left(-\frac{\partial F(\theta,a)}{\partial\theta}\right) = \left\| -\frac{\partial F}{\partial\theta} = \frac{\bar{H}-F}{\theta}\right\| = d\left(\frac{\bar{H}-F}{\theta}\right) = \\ & -\frac{d\bar{H}}{\theta} - \frac{\bar{H}}{\theta^2}d\theta = d\left(-\frac{F}{\theta}\right) = \frac{d\bar{H} - \bar{\mathcal{A}}\,da}{\theta} = \frac{dU - \bar{\mathcal{A}}\,da}{\theta} \end{aligned}\right.$$

$$\frac{1}{\theta}(dU + \bar{\mathcal{A}}\,da) = \frac{dS}{k_B}$$

$$\boxed{-\frac{\partial F}{\partial\theta} = \frac{\bar{H}-F}{\theta}}$$ — ур. Гиббса-Гельмгольца.

$$\bar{\mathcal{A}} = -\frac{\partial\bar{H}}{\partial a} = -\frac{\partial F}{\partial a}$$

$$d\left(-\frac{\partial F}{\partial\theta}\right) = \frac{1}{\theta}d\bar{H} - \frac{1}{\theta^2}(\bar{H}-F)\,d\theta - \frac{1}{\theta}\left[\frac{\partial F}{\partial\theta}d\theta + \frac{\partial F}{\partial a}da\right] =$$

$$= \frac{1}{\theta}d\bar{H} - \frac{1}{\theta}(\bar{H}-F)\,d\theta - \frac{1}{\theta}(\bar{H}-F)\,d\theta + \frac{1}{\theta}\bar{\mathcal{A}}\,da$$

$$G(p,q) \equiv G(x)$$

$$\bar{G} = \int_{(x)} G(x)\, e^{\frac{F(\theta,a)-H(x,a)}{\theta}}\,dx$$

Энтропия или энергия системы как уменьшение и увеличение числа состояний системы.

$$S = -k_B\frac{\partial F}{\partial\theta} = -\frac{(F-\bar{H})}{\theta} = \int_{(x)} \frac{F-H(x)}{\theta}\, e^{\frac{F-H(x)}{\theta}}\,dx =$$

$$= -k_B\int_{(x)} \ln\exp[(F-H(x))/\theta]\,\exp[(F-H(x))/\theta]\,dx =$$

$$= -k_B\,\overline{\ln w(x)}$$

(1) $S = -k \int_{(x)} w(x) \ln w(x)\, dx$

В том ГД распределение системы достигает max энтропии

(1) - основная энтропия по Шенону

Леммы Гиббса:

① Воспользуемся определением среднего от какой-то физической величины:

$$\bar{G} = \int_{(x)} G(x)\, e^{\frac{F-H}{\theta}}\, dx$$

$$\frac{\partial \bar{G}}{\partial \theta} = \int_{(x)} G(x)\, e^{\frac{F-H}{\theta}} \left(-\frac{1}{\theta^2}(F-H) + \frac{1}{\theta}\frac{\partial F}{\partial \theta} \right) dx =$$

$$= -\frac{1}{\theta^2}\overline{G(F-H)} + \frac{1}{\theta}\frac{\partial F}{\partial \theta}\bar{G} = \left\| \frac{\partial F}{\partial \theta} = -\left(\frac{\bar{H}-F}{\theta}\right) \right\| =$$

$$= -\frac{1}{\theta^2}\left(\overline{G(F-H)} - \frac{(\bar{H}-F)}{\theta^2}\theta\right) = \frac{1}{\theta^2}\left(\bar{G}F + G\bar{H} - \bar{H}G - F\bar{G}\right) =$$

$$= \frac{1}{\theta^2}\left[\left(\overline{GH} - \bar{H}\bar{G}\right) + \bar{G}\left(H - \bar{H}\right)\right] = -\frac{1}{\theta^2}\overline{(H-\bar{H})(G-\bar{G})}$$

$$\overline{\bar{G}(H-\bar{H})} = 0, \quad \bar{G}\bar{H} - \bar{G}\bar{H} - \bar{G}\bar{H} + \bar{G}\bar{H} = 0$$

② $$\frac{\partial \bar{G}}{\partial a} = \frac{1}{\theta}\int_{(x)} G(x)\, e^{\frac{F-H}{\theta}} \left(\frac{\partial F}{\partial a} - \frac{\partial H}{\partial a}\right) dx + \int_{(x)} \frac{\partial G}{\partial a}\, e^{\frac{F-H}{\theta}}\, dx =$$

$$= \frac{1}{\theta}\frac{\partial F}{\partial a}\bar{G} - \frac{1}{\theta}\overline{G\frac{\partial H}{\partial a}} + \overline{\frac{\partial G}{\partial a}} = \frac{1}{\theta}\left(\frac{\partial F}{\partial a}\bar{G} - \overline{G\frac{\partial H}{\partial a}}\right) + \overline{\frac{\partial G}{\partial a}}$$

переписка влево =>

$$\overline{\frac{\partial G}{\partial a}} - \overline{\frac{\partial G}{\partial a}} = \frac{1}{\theta}\left(\frac{\partial F}{\partial a}\bar{G} - \overline{G\frac{\partial H}{\partial a}}\right) + \frac{1}{\theta}\bar{G}\left(\overline{\frac{\partial H}{\partial a}} - \overline{\frac{\partial H}{\partial a}}\right) =$$

$$= -\frac{1}{\theta}\overline{\left(\frac{\partial H}{\partial a} - \overline{\frac{\partial H}{\partial a}}\right)(G-\bar{G})}$$

Отклонение обобщенной энергии → 0, при кол-ве частиц → ∞ Релаксация

пусть $G = H \to \frac{\partial \bar{H}}{\partial \theta} = -\frac{1}{\theta^2}\overline{(H-\bar{H})^2}$

$$\Delta U = H - \bar{H} = H - U$$

$$\sqrt{\frac{\overline{(\Delta U)^2}}{\bar{H}^2}} = \frac{\theta}{\bar{H}}\sqrt{\overline{\frac{\partial H}{\partial \theta}}} = \frac{kT}{\bar{H}}\sqrt{\frac{C_v}{k_B}}$$

↳ отклонение средних квадратичных флуктуаций

$$\left(\frac{\partial \bar{H}}{\partial \theta}\right)_V = \frac{1}{k_B}\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = \frac{1}{k_B}C_v$$

$U \sim H \sim N$, $C_v \sim N$

$$\sqrt{\frac{\overline{(\Delta U)^2}}{\bar{H}^2}} \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \xrightarrow{N \to \infty} 0$$

T, V, N, $\bar{H} = U = F$

E, V, N → микроканонич. ансамбль

Отклонение флуктуации от среднего величины, его можно принебречь → кажд. частица может где-то обеспечить свою энергию, т.к. она мало отлич. от внутр. энергии системы.

Леммы показали, что **каноническое и микроканонич. распределения эквив-ны** (для систем с большим числом частиц)

$$w(x) = e^{\frac{F(N,V,T) - H(x,V)}{\theta}}, \quad w = -\frac{1}{\ln(2,\theta)}\delta(E - H(x,\theta))$$

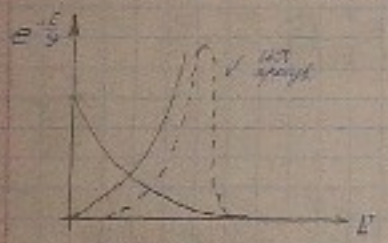
Функция микросостояния выражается через её средние значения

$$\bar{F} = \int\limits_{\{x_1, x_2, \dots, x_n\}} F(x_1, \dots, x_n)\, w(x_1, \dots, x_n)\, dx_1 \dots dx_n = \int\limits_{(F)} F\, w(F)\, dF$$

$$w(F) = \int\limits_{\{x_1, \dots, x_n\}} \delta(F - F(x_1, \dots, x_n))\, w(x_1, \dots, x_n)\, dx_1 \dots dx_n$$

$$w(E) = \Omega(E) \int\limits_{(x)} \frac{\delta(E - H(x))}{\Omega(E)} e^{\frac{E - H(x)}{\theta}} dx =$$

$$= \Omega(E)\, e^{\frac{E - H(x)}{\theta}} = \Omega(E)\, e^{\frac{F - E}{\theta}}, \quad \bar{H} = E$$



$$\Omega(E) = \frac{\partial \Gamma(E)}{\partial E} \sim E^{N-1}$$

$$\Gamma(E) \sim E^{N}$$

$H(x) = E$

6.03.13

$$w(x) = e^{\frac{F(\theta, a) - H(x, \theta)}{\theta}}$$

$$Z = \int\limits_{(x)} e^{-H(x, \theta)/\theta} dx; \quad F = -\theta \ln Z$$

$$\bar{A}_k = -\left(\frac{\partial F}{\partial a_k}\right)$$

$$E = F - T\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_a, \quad S = -\left(\partial F / \partial T\right)_a$$

Рассм случай, когда гамильт. система - аддитивная величина

$$H(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^{n} H_i(x) \quad ; \quad x_i = \{p_i, q_i\}$$

→ можем при нахожд. самих интегралов

$$Z = \int\limits_{(x)} \int\limits_{(x)} \exp\left[-\frac{H_1(x_1) + H_2(x_2) + \dots + H_n(x_n)}{\theta}\right] dx_1 \dots dx_n =$$

$$= \int\limits_{(x_1)} dx_1\, e^{-\frac{H_1(x_1)}{\theta}} \dots \int\limits_{(x_n)} dx_n\, e^{-\frac{H_n(x_n)}{\theta}} \quad (=)$$

все эти интегралы одинаковые. Введем

$$z = \int\limits_{(x_i)} dx_i\, e^{-H_i(x_i)/\theta}$$

$$(=) (z)^N$$

Запишем в нам всем гамильтон $H(x_i) = \frac{p_i^2}{2m}$ mgq_i (гамильт. всей системы представлялся в виде суммы гамильтонианов для каждой из частиц) $\quad F = -\theta N \ln z$

$$w(x_1, \dots, x_n) = e^{\frac{F(\theta, a)}{\theta}} \prod_{i=1}^{n} e^{\frac{H_i(x_i)}{\theta}}$$

$$dw(x_1, \dots, x_n) = e^{F(\theta, a)/\theta} \prod_{i=1}^{n} e^{-\frac{H_i(x_i)}{\theta}} dx_1\, dx_2 \dots dx_n$$

$$w(x_1) = \left(\int\limits_{(x_2)} \int\limits_{(x_n)} dx_2 \dots dx_n \exp\left[-\frac{H_2(x_2) + \dots + H_n(x_n)}{\theta}\right] e^{\frac{F(\theta, a)}{\theta}}\right) e^{-\frac{H_1(x_1)}{\theta}} = A(\theta)\, e^{-\frac{H_1(x_1)}{\theta}}$$

→ можем сказать, что вид частицы, а их они термостат задут распр. Максвелла - Больцмана

$$\boxed{w_2(\vec{p}_1, \vec{r}_1) = A(\theta) \exp\left[-\frac{p_1^2}{2m\theta} - \frac{U(\vec{r}_1)}{\theta}\right]}$$

А как из нормировки $\int w_2(\vec{p}_1, \vec{r}_1)\, d\vec{p}_1\, d\vec{r}_1 = 1$

$$w(\vec{p}_1) = \int d\vec{r}_1\, A(\theta)\, e^{-\frac{U(\vec{r}_1)}{\theta}} e^{-p_1^2/2m\theta} = B(\theta)\, e^{-p_1^2/2m\theta}$$

$$\int w(\vec{p}_1)\, d\vec{p}_1 = 1$$

$$w(\vec{r}_1) = C(\theta)$$

$$\int d\vec{r}_1\, w(\vec{r}_1) = 1$$

Легко можно распределение по скоростям:

$m\vec{v} = \vec{p}$

$\omega(\vec{v}) = Z(\theta)\, e^{-\frac{m\vec{v}^2}{2\theta}}$

$\underline{\omega(\vec{v})\, d\vec{v}} = Z(\theta)\, e^{-\frac{m\vec{v}^2}{2\theta}}\, d\vec{v}$

ср-ти число, это частица чем скор. в инт-ле $\vec{v}, \vec{v}+d\vec{v}$

$H = K + U$

$K = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m}$ аддитивная величина

распред. по импульсам, скоростям применимо не только к жидк. и газам, но и к твердым телам, т.к. кин. энергия - аддитивная величина.

Неоднозначность своб. энергии, решение парадокса примесных своб. энергии аддитивной величины

Рассм. простейший случай идеального газа:

$H(p_1) = \frac{p_1^2}{2m}$

$\omega(p_1) = e^{-\frac{p_1^2}{2m\theta}} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \int dq_1 \int dq_2\, e^{\frac{-H_2(p_2)+\ldots-H_N(p_N)}{\theta}}$

Уже из-за спина спин и

$Z = \int_V d\vec{r}_1 \int d\vec{p}_1\, e^{-\frac{p_1^2}{2m\theta}} = V \int_{-\infty}^{\infty} dp_{1x} \int_{-\infty}^{\infty} dp_{1y} \int_{-\infty}^{\infty} dp_{1z}\, e^{-\frac{p_{1x}^2+p_{1y}^2+p_{1z}^2}{2m\theta}} =$

$= V\left(\int_{-\infty}^{\infty} dp_{1x}\, e^{-\frac{p_{1x}^2}{2m\theta}}\right)^3 = V(2\pi m\theta)^{3/2}$

$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda x^2}\, dx = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}}$

$F = -\theta \ln (2\pi m\theta)^{\frac{3}{2}N} V^N = -N\theta\left(\frac{3}{2}\ln\theta + \ln V + \ln(2\pi m)^{3/2}\right)$

$F = F(V, \theta, N)$

$F(\lambda V, \lambda N, \theta) \neq \lambda F(V, N, \theta) - \lambda N\theta \ln \lambda$

не если аддитивная формула.

добавим к F такую величину $N\theta(\ln N - 1) \to$

$F = -N\theta\left(\frac{3}{2}\ln\theta + \ln\frac{V}{N} + \ln(2\pi m)^{3/2} + 1\right)$

$F(\lambda V, \lambda N, \theta) = -\lambda N\theta\left(\frac{3}{2}\ln\theta + \ln\frac{V}{N} + \ln(2\pi m)^{3/2} + 1\right) = \lambda F(V, N, \theta) \to$

$\to$ своб. энергия стала аддитивной величиной

Как нормировать стат. сумму?

$N\theta(\ln N - 1) = \theta(N\ln N - N) = \ln N!\, \theta$

фактор Гиббса

$\ln N! = N\ln N - N$

$Z = e^{-\ln N!} \int e^{-\frac{H(x)}{\theta}}\, dx = \frac{1}{N!}\int_{(\Omega)} e^{-\frac{H(x)}{\theta}} \frac{dx}{(2\pi\hbar)^{3N}}$, $dx = dp_1\, dq_1 \ldots dp_N\, dq_N$

нужно разделить действие, а чтобы сохранялись делим на $(2\pi\hbar)^{3N}$

$\boxed{F = -N\theta\left(\frac{3}{2}\ln\theta + \ln\frac{V}{N} - \ln(2\pi m)^{3/2} - \ln(2\pi\hbar)^3\right)}$ - правильная длина своб. энергии

Найдем S: $S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V$

$\boxed{S = +Nk\left[\frac{3}{2}\ln\theta + \ln\frac{V}{N} + \frac{3}{2}\ln\left(\frac{m}{2\pi}\right) - 3\ln h + \frac{5}{2}\right]}$ - ф. Сакура-Тетрода

энтропия - ф. аддитивная

Если не учитывать ф. Гиббса - своб. энергия не аддитивная величина $\Leftarrow$ приводит к парадоксу Гиббса $\Rightarrow$

$S = Nk\left(\frac{3}{2}\ln\theta + \ln V + \ln(2\pi m)^{3/2} + \frac{3}{2}\right)$

$$S(\lambda V, \lambda N, \theta) \neq \lambda S(V, N, \theta) + N\lambda \ln \lambda$$

$$\Delta S = S(\lambda V, \lambda N, \theta) - \lambda S(V, N, \theta) - N\lambda \ln \lambda$$

Можем получить все параметры ТД системы. Найдем внутр. энергию

$$E = F - TS = N k_B T \frac{3}{2} = \boxed{\frac{3}{2} N k_B T = E}$$

Теплоемкость $C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = \boxed{\frac{3}{2} N k_B}$

Если хотим найти молярную теплоемк-ть:

$N = N_A$

$N_A k_B = R$ $\Rightarrow$ $\boxed{C_V = \frac{3}{2} R}$

Получим ур-е состояния

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = \frac{N\theta}{V} \qquad \boxed{pV = N k_B T}$$

Покажем, что для клас. систем можно закон равнораспр-ния кин. энергии по степеням свободы.

$$\boxed{\overline{\frac{1}{2} p_i \frac{\partial H}{\partial p_i}} = \overline{\frac{p_i^2}{2m}} = \frac{\theta}{2}}$$

$$\boxed{\overline{\frac{1}{2} q_i \frac{\partial H}{\partial q_i}} = \frac{\theta}{2}}$$ – Th Вириала

13.03.2013г. $\frac{1}{2} \overline{q_k \frac{\partial H}{\partial q_k}} = -\frac{1}{2} \overline{q_k f_k} = \frac{\theta}{2}$, $f_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}$

Самостоят. или энергии Th Вириала.

Покажем, что: $\overline{x_i \frac{\partial H}{\partial x_k}} = \theta \delta_{ik}$ $\quad x_i - q_i$, $x_{i+1} - p_i$

if x_i - обобщ. коорд. – Th Вириала

if x_i - обобщ. имп. – Th о равномерн. кин. эн. $\frac{F(\theta,\theta) - H(x,\theta)}{\theta}$

$$\Delta \quad x_i \frac{\partial H}{\partial x_k} = \int_{(x)} x_i \frac{\partial H}{\partial x_k} e \, dx_1 \ldots dx =$$

// if дим и разд. на θ => вираж. с обратной разн.

$$= -\theta \int x_i \frac{\partial}{\partial x_k} e^{\frac{F - H(x,\theta)}{\theta}} dx_1 \ldots dx_k = \text{// интегр. по частям}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_k \, x_i \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} e^{\frac{F - H(x,\theta)}{\theta}}}_{\frac{\partial x_i}{\partial x_k} = \delta_{ik}} - e^{\frac{F - H(x,\theta)}{\theta}} x_i \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int dx_k \frac{\partial x_i}{\partial x_k} e^{\frac{F - H(x,\theta)}{\theta}} =$$

$$= \delta_{ik} \quad //$$

$$= \theta \delta_{ik} \int_{(x)} dx \, e^{\frac{F - H}{\theta}} = \theta \delta_{ik}$$

$$\overline{x_i \frac{\partial H}{\partial x_k}} = \theta \delta_{ik}, \quad \overline{p_k \frac{\partial H}{\partial p_k}} = \theta$$

$$L = K \cdot V$$

$$H = K + V = \sum_k p_k \frac{\partial H}{\partial p_k} - L = \sum_k p_k \frac{\partial H}{\partial p_k} - K - V$$

$$\sum_k \overline{p_k \frac{\partial H}{\partial p_k}} = 2K \qquad K_k = \boxed{\frac{1}{2} p_k \frac{\partial H}{\partial p_k} = \frac{\theta}{2}}$$ – равнораспр. кин. энергии

На одну степ. свободы приход. кин. энергии

$$K_k = \frac{1}{2} p_k \frac{\partial H}{\partial p_k}$$

Покажем, что вириал $\boxed{\overline{q_k \frac{\partial H}{\partial q_k}} = \theta}$ – Th вириала

Следствие Th вириала:

$$\frac{1}{2} \overline{q_k \frac{\partial H}{\partial q_k}} = \frac{1}{2} \overline{p_k \frac{\partial H}{\partial p_k}} = \frac{\theta}{2}$$

Так доказали Th вир-ла в мех. мех.:

$$\frac{d(p_k q_k)}{dt} = \dot{p}_k q_k + \dot{q}_k p_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k} q_k + \frac{\partial H}{\partial p_k} p_k$$

раскр. стрелочно усреднимся по времени

$$\overline{f(t)} = \lim_{t \to \infty} \frac{1}{t} \int_0^t f(\tau) d\tau$$

$$\overline{\frac{d(p_k q_k)}{dt}} = \lim_{t \to \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \frac{d}{d\tau}(p_k q_k) d\tau = \lim_{t \to \infty} \frac{1}{t} p_k q_k = 0$$

$$\boxed{p_k \frac{\partial H}{\partial p_k} = \overline{q_k \frac{\partial H}{\partial q_k}}}$$ – теор. Вириала в теор. мех.

Как применяется Th Вириала в стат. физике и закон о равномерн. кин. энергии?

Возьмем гарм. осциллятор (одномерный)

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{\alpha q^2}{2} \Rightarrow$$ найдем среднюю энергию $\Rightarrow$

$$\Rightarrow \bar{H} = \overline{\frac{p^2}{2m}} + \overline{\frac{\alpha q^2}{2}} = \left\| \overline{\frac{1}{2} q \frac{\partial H}{\partial q}} = \frac{1}{2} q \frac{\alpha 2q}{2} = \overline{\frac{\alpha q^2}{2}} \right\| = \frac{\theta}{2} + \frac{\theta}{2}$$

$$\bar{H} = \theta$$

- Ф. ангармонич. осцил-р:

$$\bar{H} = \overline{\frac{p^2}{2m}} + \overline{\frac{\alpha q^2}{2}} - \beta \overline{q^4} = \overline{\frac{p^2}{2m}} + \overline{\frac{\alpha q^2}{2}} - \beta \overline{q^4} =$$

$\beta > 0$

$$\left\| \overline{\frac{1}{2} q \frac{\partial H}{\partial q}} = \overline{\frac{1}{2} \alpha q^2} - 2\beta \overline{q^4} = \frac{\theta}{2} \right\|$$

знак вып-ся Th. вир-ла нужно домножить и вычесть $\beta \overline{q^4}$

$$= \frac{\theta}{2} + \frac{\theta}{2} + \beta \overline{q^4} = \theta + \beta \overline{q^4} \qquad \bar{H} = \theta + \beta \overline{q^4}$$

$$\bar{H}_{ан} > \bar{H}$$

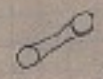
Теперь можно найти вериоятн. ф-ю пленительности и средней энергии

$$E = \bar{H} = \overline{\sum_{k=1}^{3} \frac{p_k^2}{2m}} = 3N \frac{\theta}{2} = \frac{3}{2} N k_B T$$

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = \frac{3}{2} N k_B$$

$$C_V = \frac{3}{2} N_A k_B = \frac{3}{2} R$$

Бинарная молекулярн. газ, молекулу можно представить в виде гантели и жесткой связью



$$\nu = 3 + 2 = 5$$

$$E = \frac{5}{2} N k_B T$$

$$C_V = \frac{5}{2} N k_B$$

$$C_V = \frac{7}{2} N k_B$$

Сумма атома отлично нам равенства (q_i, q_i')

$$H = \sum_k \frac{p_k^2}{2m_k} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_k \alpha_{ik} (q_i - q_i')(q_k - q_k')$$

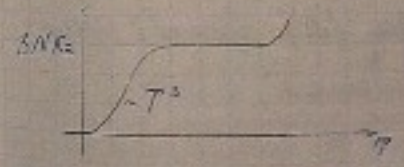
$$Q_k = \sum_i \underbrace{a_{ik}}_{\text{матрица}} q_i + b_k \rightarrow H = \sum_{k=1}^{3n} \left(\frac{P_k^2}{2m} - \frac{\alpha_k Q_k^2}{2} \right) =$$

$$= \sum_{k=1}^{3n} \left(P_k^2 + \omega_k^2 Q_k^2 \right)$$

$\hbar \omega_k$, $\hbar = 1.K$ } фонон

$$E = \bar{H} = 3N\theta \Rightarrow C_V = 3N k_B$$

C_V ↑



теплоемкость убывает, как T^3

$T \downarrow C_V \downarrow$

Большой канонический ансамбль и каноническое распр. Гиббса

мн-во абс. одинаковых, независимых систем, которые имеют макроскоп. парам. T, V

при фиксир. N – большой канонич. распр. можно формально не отличать от канонич. распр.

$$w_N(x^{(N)}) = \frac{1}{N!} e^{\frac{F_N(\theta,a) - H_N(x^{(N)})}{\theta}} \quad (=)$$

$$\sum_{N=1}^{\infty} \int_{(x^{(N)})} dx^{(N)} w_N(x^{(N)}) = \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N!} \int_{(x^{(N)})} dx^{(N)} e^{\frac{F_N(\theta,a) - H_N(x^{(N)})}{\theta}} = 1$$

Когда в сист. меняется число частиц.

$$dU = TdS - \sum_k \bar{A}_k da_k + \sum_i \mu_i dN_i$$

$$dF = -SdT - \sum_k \bar{A}_k da_k + \sum_i \mu_i dN_i$$

$$dH = TdS + \sum_k a_k dA_k + \sum_i \mu_i dN_i$$

$$dG = -SdT + \sum_k a_k dA_k + \sum_i \mu_i dN_i$$

$$G = N\mu \quad ; \quad d\mu = -\tilde{S}dT + \tilde{V}dP$$

Потенциал, у которого мы зав. на от числа частиц

$$\Omega = F - \mu N = F - G = U - TS - (U - TS + PV) = -PV$$

$$d\Omega = -SdT - PdV - Nd\mu$$

Большой ТД потенц. Гиббса (Ω) – вместе с противоположным знаком давление.

$$\Omega = -\sum_k A_k a_k$$

$$\Omega = \Omega(T, V, \mu)$$

$$S = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right)_{V,\mu} , \quad P = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial V}\right)_{T,\mu} ; \quad N = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T,V}$$

$$F_N(\theta, a) = \Omega(\theta, V, \mu) + \mu N$$

$$(=) \frac{1}{N!} e^{\frac{\Omega(\theta,a) + \mu N - H_N(x^{(N)})}{\theta}}$$ – Большое канонич. распр. Гиббса

$$e^{\frac{\Omega(\theta,a)}{\theta}} \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N!} e^{\frac{\mu N}{\theta}} \int_{(x^{(N)})} dx^{(N)} e^{-\frac{H_N(x^{(N)})}{\theta}} = 1$$

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N!} e^{\frac{\mu N}{\theta}} \int_{(x^{(N)})} dx^{(N)} e^{-\frac{H_N(x^{(N)})}{\theta}}$$ – Большой сист. интеграл

$$\Omega = -\theta \ln \mathcal{Z}$$

H_N – гамильтониан N-частиц

18.09.13

$x^{(N)}$ – фазовая точка в пр-ве размерности $6N$

Свободная энергия зависит от числа частиц.

С помощью преобразования Лежандра мы можем перейти к новому ТД потенциалу большой ТД потенциал Гиббса.

$$\Omega(T, V, \mu) = F_N(N, T, V) - \mu N \quad (*)$$

$$d\Omega = -SdT - PdV - \bar{N}d\mu$$

$$\bar{N} = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T,V} , \quad P = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial V}\right)_{T,\mu} ; \quad S = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right)_{V,\mu}$$

Если вспомним сверху $(*)$.

$$F_N = \Omega + \mu N$$

$$e^{\Omega/\theta} \underbrace{\sum_{N=0}^{\infty} \frac{e^{\mu N/\theta}}{N!} \int_{(2N)} e^{-H_N(x^{(N)})/\theta} dx^{(N)}}_{\mathcal{Z}} = 1$$

$\Omega = -\theta \ln \mathcal{Z}$ – большой сист. интеграл

Исходя из микроскопических соображений мы получили макроскопическое описание системы. Из этого мы можем получить все термодинамические ТД потенциалы.

N – среднее число частиц → сист. нах-ся в контакте с резервуаром и нормализованы.

$$w_{N_1, \dots, N_n} = \frac{1}{N_1! \dots N_n!} \exp\left[\frac{\Omega + \sum_i \mu_i N_i - H_{N_1 \dots N_n}(x^{(N_1)} \dots x^{(N_n)})}{\theta}\right]$$

$$\Xi = \sum_{N_1=0}^{\infty} \dots \sum_{N_n=0}^{\infty} \frac{\exp\left[\sum_{i=1}^{n} \frac{\mu_i N_i}{\theta}\right]}{N_1! \dots N_n!} \int_{(x_{n_1})} \dots \int_{(x_{n_n})} \exp\left[-\frac{H_{n_1 \dots n_n}}{\theta}\right] dx^{n_1} \dots dx^{n_n}$$

$$\overline{N_i} = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu_i}\right)_{T,V}$$ → у нас n - параметров и m - компонент

$$\Omega(T, a_1, \dots, a_n, \mu_1, \dots, \mu_n) = F_{n_1 \dots n_n}(N_1 \dots N_n, T, V) - \sum_{i=1}^{n} \mu_i N_i =$$

$$= -\sum_{s=1}^{n} \overline{\mathcal{J}_s} a_s \qquad \overline{\mathcal{J}_s} = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial a_s}\right)_{T, a, \mu}$$

Эквив-ть БОЛЬШОГО КАНОНИЧ. и КАНОНИЧ. анс. Гиббса.

Покажем, что у нас каноник. ансамбль Гиббса и докажем, что у нас во ансамбли эквивалентны. Это, которое входит в анс. Гиббса, мы можем принять средним значением. Докажем эквив-ть распр. Гиббса:

$$W(N') = \frac{1}{N'!} e^{\Omega/\theta} \exp\left[\frac{\mu N' - F_{N'}(\theta, a)}{\theta}\right]$$

вер-ть того, что большой Гиб. имеет N'-частиц

Это распределение имеет такую структуру:

$$e^{\Omega/\theta} e^{-F_{N'}(\theta,a)/\theta} = \int_{(x_{N'})} \exp\left[-\frac{H_{N'}(x^{(N')})}{\theta}\right] dx^{(N')} e^{-\Omega/\theta}$$

Покажем, что $\exists$ такое число N. $N = N'$, у которого max $W(N') = W(N)$. Это и есть вероятные значения.

$$\begin{cases} \left.\frac{\partial W(N')}{\partial N'}\right|_{N'=N} = 0 \\ \left.\frac{\partial^2 W(N')}{\partial N'^2}\right|_{N'=N} = 0 \end{cases}$$

проб. и достаточные условия того, что большой каноник анс. Гиббса имеет N' частиц

$$e^{\Omega/\theta} e^{-F_N(\theta,a)/\theta} = \frac{1}{N'} \int_{(x_N)} e^{-H_N(x^{(N)})/\theta} dx^{(N)}$$

внешний параметр $a = V$

N' - фиксир. число частиц

не зависит от числа частиц a, мы тоже вынесли ей в свой энергии

$$W(N) = e^{-\mu N/\theta} e^{-F_N(\theta,a)/\theta} e^{\Omega/\theta}$$

Свободная энергия определяется: $F = U - TS$

$F_{N'}$ - своб. энергия, которая мы задаем вместо

$$F_{N'} = N' f(\tilde{v}, \theta)$$ своб. эн. на 1 part.

$\tilde{v} = \frac{V}{N'}$ - объем на 1 частицу

Найдем ур. экстрем. для $W(N')$ по числу частиц N':

1) $$\frac{\partial W(N')}{\partial N'} = e^{\Omega/\theta} e^{[\mu N' - F_{N'}]/\theta} \left(\mu - \frac{\partial F_{N'}}{\partial N'}\right) = 0$$

μ - хим. потенциал внутр. среды, который совпадает с хим. потенц. среды

$$\mu = \frac{\partial F_{N'}}{\partial N'}$$ хим. потенц. тела частиц должны совпадать с хим. потенц. окр. среды

$$\frac{\partial F_{N'}}{\partial N'} = f(\tilde{v}, \theta) - N' \frac{\partial f}{\partial \tilde{v}} \frac{V}{N'^2} = f(\tilde{v}, \theta) - \frac{\partial f}{\partial \tilde{v}} \tilde{v}$$

2) $$\frac{\partial^2 W}{\partial N'^2} = \exp\left[\frac{\Omega - \mu N' - F_{N'}}{\theta}\right] \left[\underbrace{\left(\mu - \frac{\partial F_{N'}}{\partial N'}\right)^2}_{=0} - \frac{\partial^2 F}{\partial N'^2}\right] < 0$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial N'^2} > 0$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial N'^2} = \frac{\partial}{\partial N'}\left(\frac{\partial F}{\partial N'}\right) = \frac{\partial f}{\partial \tilde{v}} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial N'} - \frac{\partial^2 f}{\partial \tilde{v}^2} \tilde{v} \frac{V}{N'^2} - \frac{\partial f}{\partial \tilde{v}} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial N'} =$$

$$= -\frac{\partial^2 f}{\partial \tilde{v}^2} \frac{\tilde{v}^2}{N'} > 0 \; *$$

$$df = -\tilde{S}\, dT - P\, d\tilde{v}$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \tilde{v}}\right)_T = -P \; ; \; \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \tilde{v}^2}\right) = -\left(\frac{\partial P}{\partial \tilde{v}}\right)_T$$

Требование * $\left(\frac{\partial P}{\partial \tilde{v}}\right)_T < 0$ - условие устойчивости

Рассмотрим, как ведет себя $W(N')$ в окр. точки N:

$$W(N') = e^{\Omega/\theta} \exp\left[\frac{\mu N' - F_N(\theta, a) - \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{N=N} (N' - N) - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 F}{\partial N^2}\right)_{N=N} (N' - N)^2}{\theta}\right] =$$

$$= e^{\mu N/\theta} \exp\left[-\frac{\mu N - G_N(\theta,V)}{\theta}\right] \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 F}{\partial N^2}\right)_{\mu N}(N'-N)/\theta\right].$$

$$\cdot W(N) \cdot \exp\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T (N'-N)^2/\theta\right] = W(N)\exp\left[\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T (N'-N)^2/2\theta\right]$$

Мы получили распределение Гиббса

$$\underbrace{\left(\mu - \frac{\partial F}{\partial N}\right)}_{=0}(N'-N) \qquad \delta N = N'-N$$

$$(\delta N)^2 = 2\theta/|(\partial P/\partial V)| = \frac{2\theta N}{|(\partial P/\partial V)_T|}$$

Получили, что при увеличении СКО, мы должны разделить $\partial P/\partial V$ → и это будет дисперсия. Определение СКО от $\overline{\text{мат}}$ значения:

$$\delta N = \sqrt{\frac{\overline{(\delta N)^2}}{N^2}} = \sqrt{\frac{2\theta N}{|(\partial P/\partial V)_T| N^2}} \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \xrightarrow[N\to\infty]{} 0$$

$\overline{(\delta x^2)} = \Delta^2$ → СКО

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial N^2}\right)_{\mu,N} = -\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)\frac{V^2}{N} = -\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)\frac{V^2}{N}$$

$$F_N(\theta,V) - F_N(\theta,V) = \left(\frac{\partial F_N}{\partial N}\right)_{\mu,N}(N'-N) + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 F}{\partial N^2}\right)_{\mu,N}$$

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial N^2}\right) = -\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T V^2$$

$$\overline{\delta N^2} = \frac{2\theta}{|(\partial P/\partial V)| V^2} = \frac{2\theta N^2}{|(\partial P/\partial V)_T| V^2 N} \text{ – средняя квадратичная флуктуация}$$

$\frac{1}{\sqrt{N}} \xrightarrow[N\to\infty]{} 0$ – отклонение от наиболее вероятного (или среднего) значения ок мало и наши сист принадлежит анс Гиббса

$$Z = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\mu N/\theta} \int_{(\Gamma_N)} \exp\left[-\frac{H_N(\Gamma^N)}{\theta}\right] d\Gamma^N = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{e^{\mu N/\theta}}{N!} Z_N$$

это преобразование Лапласа

$$S = k_B \ln \Gamma = k_B \ln \underbrace{\Delta}_{\text{шаг расп. ед. ед. мер}} \Delta E = k_B \ln \frac{\partial \Gamma}{\partial E}\Delta E =$$

Γ – $\int_{H(p,q)\le E} dp\,dq$, $H(p,q) = E$, $H(p,q) = E + dE$

→ энтропия Ландау

20.03.2013 г.

для ид газа $\Gamma(E) \sim E^{3N}$, или $\Gamma = CE^N$

$$= k_B \ln \frac{C\frac{3}{2}N}{E}\Delta E = k_B \ln \Gamma + k_B \ln \frac{3}{2}N\frac{\Delta E}{E} \qquad N \sim 10^{23}, \ \ln N \sim 23 \ln 10$$

Стат. вес – кол-во квантовых состояний, которое имеет заданное значение энергии

Покажем, что энтропия дает нам информацию о степени упорядоченности системы:

Понятие энтропии можно ввести как для классики, так и для квантомеханики → дает возможность обосновать II начало т/д.

Проще рассм. случай, когда сист. квантово мех., а плотность вер-ти принимает дискретные значения

$$S = -k_B \sum_n w_n \ln w_n$$

$$\sum_n w_n = 1 \leftarrow \int_{(\Gamma)} w(\Gamma)\,d\Gamma = 1, \quad w(\Gamma) > 0$$

① рассм случай, когда сист. нах-ся в опред. кв состоянии

$w_{n_0} = 1 \to S = 0$ $\quad n = n_0$ – номер опред. кв состояния

Энтропия замкн-й сист. $= 0$

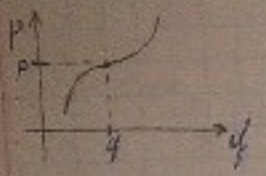
② пусть сист. принимает знач. $n = 1, \ldots, \Omega$ – кв состояния, а вер-ть нахож. каждого сост. одинакова

$$\boxed{w_n = \frac{1}{\Omega}}, \quad \Omega \text{ – число вер. кв состояний шт. } S$$

Т.к. число сост. равновероятно → полная

Гиббс ввел фазовое пр-во.

dim $\Gamma = 6N$, но если 3N обобщ. коорд и 3N обобщ. импульсов. Точка будет хар-ть микросостояние системы, точки будут двигаться вдоль фазовых траекторий.



Посмотрим, как по-другому можно описать систему. Возьмем ур-я.

$$\dot{p}_1 = -\frac{\partial H}{\partial q_1}$$

$$\frac{dq_1}{dp_1} = -\frac{\partial H/\partial p_1}{\partial H/\partial q_1} \qquad \frac{dq_{3N}}{dp_1} = -\frac{\partial H/\partial p_{3N}}{\partial H/\partial q_1}$$

$$\frac{dp_1}{dp_1} = \frac{\partial H/\partial q_1}{\partial H/\partial q_1} \qquad \frac{dp_{3N}}{dp_1} = \frac{\partial H/\partial q_{3N}}{\partial H/\partial q_1}$$

$\Big\}$ 6N-1 инт. движ.

решения этих ур-й дадут нам интеграл движения обозначим:

$L_1 = H(p, q)$ ✓ ур-е интеграл-ния

$\Phi_1(p, q) = L_1$, $\quad \Phi_{3N}(p, q) = L_{3N}$

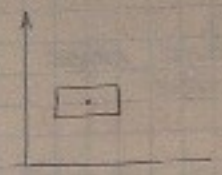
$\Psi_1(p, q) = \beta_1$, $\quad \Psi_{3N}(p, q) = \beta_{3N}$

- Фазовая траектор. лежит на пересечении интегральных поверхностей
- $1^{\text{й}}$ интег. движ. – гамильтониан
- $\Psi_1(p, q) = t + \beta_1$ – задает скорость движения вдоль кривой

Ансамбль Гиббса – мн-во $\sqrt{\text{интуитивный}}$ невзаимод. м/у собой систем, каждая из которых нах-ся в своем мн-ве состояний, реализующим макрос. состояние

↳ хотя м/у собой не взаимод.

Мн-во системы распределены с определенной плотностью. Введем мн. фазового пр-ва и спросим число частиц из ансамбля Гиббса, которые попадают в объем элемента фазового пр-ва. Это число пропорц. объему.



$$dn = \rho(p, q, t)\, dp\, dq$$

$$\int_\Gamma dn = n = \int \rho(p, q, t)\, dp\, dq$$

Вспомним: $\frac{dp_1}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_1}$ $\qquad L_1 = H(p, q)$ 13.02.2018г

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial H}{\partial q_1} = \frac{\partial^2 H}{\partial t \partial q_1} = \frac{\partial}{\partial q_1}\frac{\partial H}{\partial t} = 0$$

$p_1 = \Psi(p, q)t + L$

$\Psi_1(p, q) = t + L$

Вернемся к нашей задаче.*
когда мы говорим экспериментируем мы задаем макросостояние.

$$\{q, p\} \longrightarrow \underbrace{a_1 \ldots a_3}_{\text{внешн. пар.}}, T$$

Каким образом из микрост. мы получаем макросост.

- Решать 6N-ую сложно. Мы брали ф. $G(p, q)$ и хотим найти её мгн. значение

$$G(p, q)_{\text{мгн}} = \lim_{t \to \infty} \frac{1}{t}\int_0^t G\, d\tau \quad (1)$$

хаос → S-max S → S - стат. неопределенность сист.

③ энтропия для 2х случ величин

$$S[X,Y] = -k_B \int_{(X)} dx \int_{(Y)} dy\, \omega(x,y) \ln \omega(x,y)$$

для вер. 2х случ. величин можно ввести понятие условной вероятности: - хар. степень взаимосвязанности 2х случ. величин

$$\omega(x,y) = \omega(x|y)\,\omega(y) = \omega(y|x)\,\omega(x)$$

$$\omega(x|y) = \frac{\omega(x,y)}{\omega(y)}, \quad \omega(y|x) = \frac{\omega(x,y)}{\omega(x)}$$

$$\omega(x,y) = \omega(x)\,\omega(y)$$

Условная энтропия:

④ $$S[x|y] = -k_B \int_{(x)} \int_{(y)} dx\,dy\, \omega(x,y) \ln \omega(x|y)$$

$$S[x|y] = S[x,y] - S[y]$$

$$S[y|x] = S[x,y] - S[x]$$

→ с ростом упорядоч. случ. величины уменьшается

$$S[x|y] \leq S[x]$$

$$S[y|x] \leq S[y]$$

"=" - когда стат. вел. независимы, знание у и х стать муд. бесполезно

$$\ln a \geq \left(1 - \frac{1}{a}\right)$$

⑤ Можем ввести понятие информации

$$\boxed{I(x) = S(x) - S(x|y) \geq 0}$$

- if стат. величины связаны м/у собой, то получ. информ.
- if x, y независ. м/у собой - стат. независимы → инф. нет.

Неравновесная система - когда сист. не нах-ся в равновесном состоянии - релаксирует и зависит от времени $\omega(x,t)$

$$S(t) = -k_B \int_{(x)} \omega(x,t) \ln \omega(x,t)\, dx$$ - энтропия по Гиббсу

Попробуем это определение, покажем, что сумма заняв возрастания энтропии (∃ начало т.д.)

Докажем Th Гиббса:

пусть есть система, у которой энергия постоянна

$$E = \int_{(x)} H(x)\, \omega(x)\, dx = const \Rightarrow \text{сист. замкнута}$$

$$\omega(x) = e^{\frac{F - H(x)}{\theta}}$$

возьмем другую ф-ию вер-ти $\omega_1(x)$ и потребуем, чтобы

$$\int_{(x)} \omega_1(x)\, dx = 1$$ и, чтобы выполн.

с помощью ф-ии энергии должна также не изменится:

$$E = \int_{(x)} H(x)\, \omega_1(x)\, dx$$

$$S_1 = -k_B \int_{(x)} dx\, \omega_1(x) \ln \omega_1(x)\, dx$$

Th Энтропия выгоднее с помощью микроканонич. распред. Гиббса → энтропия выгоднее с ним ∀ другого распред.

$$S(x) \geq S_1(x)$$

знак "=" возможен только, если $\omega(x) = \omega_1(x)$

Δ Зададим $\omega_1(x) = \exp\left[\frac{F_1 - H(x) - u_1(x)}{\theta}\right]$

$$e^{-\frac{F_1}{\theta}} = \int_{(x)} e^{-\frac{H(x) - u_1(x)}{\theta}} dx$$

рассм. разность $S[x] - S_1[x] =$

$$= -k_B \int_{(x)} dx \left[e^{\frac{F - H(x)}{\theta}} \cdot \frac{F - H(x)}{\theta} - e^{\frac{F_1 - H(x) - u_1(x)}{\theta}} \cdot \frac{F_1 - H(x) - u_1(x)}{\theta} \right].$$

// из усл. нормировки $\int_{(x)} e^{\frac{F - H(x)}{\theta}} dx = \int_{(x)} e^{\frac{F_1 - H(x) - u_1(x)}{\theta}} dx = 1$ //

$$= -k_Б \int_{(x)} dx\, e^{\frac{F_2 - H(x) - U_1(x)}{\theta}} \quad \frac{F - F_2(x) + U_1(x)}{\theta} =$$

замена 1 вар

$$\left\{ F - F_2 + U_1(x) = \eta \quad \Rightarrow e^{\frac{F_2 - H(x) - U_1(x)}{\theta}} = e^{\frac{F - H(x) - \eta}{\theta}} \right\}$$

$$= -\frac{k_Б}{\theta} \int_{(x)} dx\, e^{\frac{F - H(x) - \eta}{\theta}} \cdot \eta$$

$$\int \left(e^{\frac{F - H(x)}{\theta}} - e^{\frac{F - H(x) - \eta}{\theta}} \right) dx = 0$$

$$\int e^{\frac{F - H(x)}{\theta}} \left(1 - e^{-\frac{\eta}{\theta}} \right) dx = 0$$

$$S - S_1 = -k_Б \int dx\, e^{F - H/\theta} \left(\eta e^{-\eta/\theta} + e^{-\eta/\theta} - 1 \right) dx$$

$$S - S_1 = -k_Б \int \left[\frac{F - H(x)}{\theta} e^{\frac{F - H(x)}{H}} - \frac{F_2 - H(x) - U_1(x)}{\theta} e^{\frac{F_2 - H(x) - U_1(x)}{\theta}} \right] dx.$$

25.03.2013

$$= -k_Б \int_{(x)} e^{\frac{F_2 - H(x) - U_1(x)}{\theta}} \quad \frac{F - F_2 + U_1(x)}{\theta}\, dx =$$

замена 2 вар

$$\eta = \frac{F_2 - F - U_1(x)}{\theta}$$

$$k_Б \int_{(x)} \eta\, e^{\frac{F - H(x)}{\theta}} e^{\frac{F_2 - F - U_1(x)}{\theta}} dx = k_Б \int e^{\frac{F - H(x)}{\theta}} \eta\, e^{\eta}\, dx \ominus$$

$$\int_{(x)} dx\, e^{\frac{F - H(x)}{\theta}} \left(1 - e^{\eta} \right) dx = 0$$

$$\ominus\ k_Б \int_{(x)} e^{\frac{F - H(x)}{\theta}} \left(\eta e^{\eta} + \underbrace{1 - e^{\eta}}_{\leq 0} \right) dx \geq 0$$

↳ равно 0, когда $\eta = 0 \rightarrow \omega_1(x) = \omega_2(x)$

знаем, что $\ln a \geq 1 - \frac{1}{a}$

обозначим $a = e^{\eta}$

$$a \ln a - 1 - a = a\left(\ln a - \frac{1}{a} - 1 \right) \geq 0 \longrightarrow$$

$$S \geq S_1$$

(1/2) рассмотрим эволюцию системы. Докажем закон возрастания энтропии для замкнутых систем.

- при $t_{нач}$ в сист. устанавливается равновесие
- $\omega_1(x,t)$ – ф-ия в р-ии, которой описывается данная система

$$\int_{(x)} dx\, \omega_1(x,t) \cdot H(x) = \int_{(x)} \omega(x) H(x)\, dx$$ – энергия и ф. распределения →

→ она удовлетв. усл. нормировки:

$$\int_{(x)} \omega_1(x,t)\, dx = 1$$

$$S_1(t) = -k_Б \int_{(x)} \omega_1(x,t) \ln \omega_1(x,t)\, dx$$

$$\boxed{S \geq S(t)}$$ ← в процессе эволюции энтр. системы возрастает и в сост. м.б. равновесия имеет экстремум

Чтобы расчет сист. хоть было подробно, нужно знать $\omega_1(x,t)$ (ф-ку сложнее) – не может сказать ур. Больцмана, т.к. она обратима.

Неидеальные газы

(будем учитывать взаимод. м/у частицами, чего мы НЕ делали для идеал. газа)

$$H(p,q) = E(p,q) = \underbrace{\sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m}}_{\text{кин. эн.}} + \underbrace{U(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N)}_{\text{пот. эн.}}$$

для простоты расчета ограничимся НУ

знаем гамильтон → систем гамильтон → → свой энергии.

$$Z = \frac{1}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} \int_{(P)} e^{-\frac{H(p,q)}{\theta}} d\vec{p}_1 \ldots d\vec{p}_N \, dV_1 \ldots dV_N \quad (=)$$

разобьем интеграл на $\vec{p}$ по импульсу и по объему

$$\int_V \ldots \int_V dV_1 \ldots dV_N \, e^{-\frac{U(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N)}{\theta}}$$

- газ заряженных частиц только парные взаимодействия
- газ идеальный $U(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) = 0$

$$\int_V \ldots \int_V dV_1 \ldots dV_N \, e^{-\frac{U}{\theta}} = V^N$$

$$(=) \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N} N!} \int_{(P)} e^{-\sum_i \frac{p_i^2}{2m}} d\vec{p}_1 \ldots d\vec{p}_N \int_V \ldots \int_V dV_1 \ldots dV_N \left(e^{-\frac{U}{\theta}} + 1 - 1\right) =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N} N!} \int \ldots \int d\vec{p}_1 \ldots d\vec{p}_N \, e^{-\frac{\sum_i p_i^2}{2m}} \left[V^N + \int_V \ldots \int_V dV_1 \ldots dV_N \left(e^{-\frac{U}{\theta}} - 1\right)\right]$$

$$F = -\theta \ln Z = -\theta \left[\ln\left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N} N!} \int \ldots \int d\vec{p}_1 \ldots d\vec{p}_N \, e^{-\frac{\sum_i p_i^2}{2m}} \cdot V^N\right) + \right.$$

$$\left. + \ln\left(1 + \frac{1}{V^N} \int_V \ldots \int_V dV_1 \ldots dV_N \left(e^{-\frac{U}{\theta}} - 1\right)\right)\right] =$$

рассм. насколько редко газ, что бывает - или только 2 молекулы $\frac{N(N-1)}{2} \sim \frac{N^2}{2}$; $N \gg 1$

$$= F_{ид} - \theta \ln\left[1 + \frac{1}{V^N} \int_V \ldots \int_V dV_1 \, dV_2 \ldots dV_N \left(e^{-\frac{U}{\theta}} - 1\right)\right] =$$

$$= F_{ид} - \theta \ln \underbrace{\left[1 + \frac{1}{V^N} \frac{N^2}{2} V^{N-2} \int_V \int_V dV_1 \, dV_2 \left(e^{-\frac{U_{12}}{\theta}} - 1\right)\right]}_{\text{малый}} \sim$$

$$\sim F_{ид} - \theta \ln \frac{N^2}{2V^2} \int_V \int_V dV_1 \, dV_2 \, e^{-\frac{U_{12}}{\theta}}$$

$$(=) \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N} N!} \int_P e^{-\sum_i \frac{p_i^2}{2m}/\theta} d\vec{p}_1 \ldots d\vec{p}_N \int_V \ldots \int_V dV_1 \ldots dV_N \left(e^{-\frac{U}{\theta}} + 1 - 1\right) =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N} N!} \int \ldots \int d\vec{p}_1 \ldots d\vec{p}_N \, e^{-\sum_i p_i^2/2m\theta} \left[V^N + \int_V \ldots \int_V dV_1 \ldots dV_N \left(e^{-\frac{U}{\theta}} - 1\right)\right]$$

$$F = -\theta \ln Z = F_{ид} - \theta \ln\left[1 + \frac{1}{V^N} \int_V \ldots \int_V dV_1 \ldots dV_N \left(e^{-\frac{U}{\theta}} - 1\right)\right] =$$

$$= F_{ид} - \theta \frac{N^2}{2V^2} \int_V \int_V dV_1 \, dV_2 \left(e^{-\frac{U_{12}}{\theta}} - 1\right) = F_{ид} - \theta \frac{N^2}{V^2} B(T)$$

$$B(T) = \frac{1}{2} \iint dV_1 \, dV_2 \left(e^{-\frac{U_{12}}{\theta}} - 1\right)$$

$$P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = \frac{N\theta}{V} + \theta \frac{N^2}{V^2} B(T)$$

$$\boxed{P = \frac{N\theta}{V} + \theta \frac{N^2}{V^2} B(T)}$$ - ур. Вайла

$U_{12} = U_{12}(\vec{r}_{12})$ $\qquad \ln(1-x) \sim x$

$2r_0$ - при рассм., на каких 2 атома могут взаимодействовать

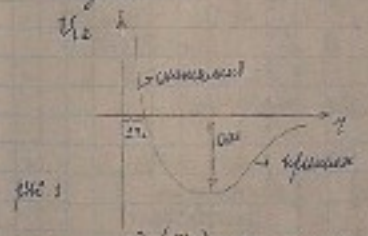


рис 1

1. $\frac{U_0}{k_B T} \ll 1$ — малые $r < 2r_0$, $B(T) > 0$ — $U_{12} < U_0$
2. $\frac{U_0}{k_B T} \gg 1$ — большие $r > 2r_0$, $B(T) < 0$

$B(T_0) = 0$ — инвариант Вайла

$$\boxed{P = \frac{N k_B T}{V}\left(1 + \frac{N}{V} B(T)\right)}$$ - ур-е Вайла

$$B(T) = \frac{1}{2} \int_0^\infty \left(1 - e^{-\frac{U_{12}}{\theta}}\right) dl$$

27.03.2013

рис 1 → для больших $2r_0$ - не играет роли

Чтобы все было корректно, нужно, чтобы $\int^\infty$ для всех сущ-й $U_{12} \sim \frac{1}{r^3}$, а для

· Сис. Ван-дер-Ваальса $\frac{1}{r^6}$

· для плазмы $\frac{1}{r}$

Покажем, основываясь на ур. Больц., как можно получить ур. Ван-дер-Ваальса.

Вычислим $B_2(T)$ в зав-ти от того, как ведут себя начальные взаимод. пар атомов (числ. 5.28). Перейдем в сферическую систему координат

$$B_2(T) = 2\pi\left[\int_0^{2r_0}\left(1-e^{-\frac{U_{12}}{\theta}}\right)r^2dr - \int_{2r_0}^{\infty}\left(1-e^{-\frac{U_{12}}{\theta}}\right)r^2dr\right] =$$

в случае, когда вклад притяж. пр. $U_{12}/\theta \ll 1$

$$= 2\pi\left[\int_0^{2r_0} r^2dr - \int_{2r_0}^{\infty}\frac{|U_{12}|}{\theta}r^2dr\right] =$$

$$= \frac{16}{3}\pi r_0^3 - \frac{a}{\theta} = b - \frac{a}{\theta} \qquad b = \frac{16}{3}\pi r_0^3, \quad a = 2\pi\int_{2r_0}^{\infty}|U_{12}|r^2dr$$

подставляем в ур. для своб. энергии.

$$F = F_{id} + \frac{N^2}{V}(b\theta - a)$$

$$F_{id} = -N\theta\ln\left[\frac{eV}{N}\left(\frac{mT_{ac}}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}\right] = \left\{\text{вводим слагаемое}\right\} =$$

$$= Nf(T) - N\theta\ln\frac{eV}{N} \to \text{подставляем}$$

$$P = Nf'(T) - N\theta\ln\frac{eV}{N} + \frac{N^2}{V}b\theta - \frac{N^2}{V}a, \quad \text{объем, занятый молекулами}$$

вводим слагаемое $-N\theta\left(\ln V - \frac{Nb}{V}\right) = -\theta\ln(V-Nb)$, $\frac{Nb}{V} \ll 1$

$$\ln(V-Nb) = \ln V\left(1-\frac{Nb}{V}\right) = \ln V + \ln\left(1-\frac{Nb}{V}\right) =$$

$$= \ln V - \frac{Nb}{V}$$

$$F = F_{id} - N\theta\ln\left(1-\frac{Nb}{V}\right) - \frac{N^2}{V}a$$

$$\ln\left(1-\frac{Nb}{V}\right) = \ln\frac{V-Nb}{V} = \ln(V-Nb) - \ln V$$

$$\left(P + \frac{N^2}{V^2}a\right)(V-Nb) = N\theta$$

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V-b') = N\theta$$

Уравнение состояния для НЕ идеального газа (в вириальн. разл. π)

$$P = \frac{Nk_BT}{V}\left(1 + \frac{N}{V}\underbrace{B_2(T)}_{\text{учитывает парное взаимод.}} + \frac{N^2}{V^2}\underbrace{C(T)}_{\text{тройное}} + \frac{N^3}{V^3}\underbrace{D(T)}_{\text{четверные}} + \ldots\right)$$

удобно работать с большим кан. пот. Гиббса.

$$\Omega(T,V,\mu) = F - \mu N = -PV$$

· частицы нет $(n=0)$

$H_0 = 0$

· 1 частица $(n=1)$.

$$H_1(p,q) = \frac{p^2}{2m}$$

· 2 частицы $(n=2)$;

$$H_2(p,q) = \sum_{i=1}^{2}\frac{p_i^2}{2m} + U_{12}$$

· 3 частицы $(n=3)$ $\qquad U_{123} = U_{12} + U_{23} + U_{13}$

$$H_3(p,q) = \sum_{i=1}^{3}\frac{p_i^2}{2m} + U_{123}$$

вводим обозначение $\quad J = \frac{e^{-\frac{\mu}{\theta}}}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{-\frac{p^2}{2m\theta}}d^3p =$

$$= \left\{\frac{p_x^2}{2m\theta} + \frac{p_y^2}{2m\theta} + \frac{p_z^2}{2m\theta}\right\} = e^{-\frac{\mu}{\theta}}\left(\frac{m\theta}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} = \frac{1}{\lambda_{th}^3}$$

$$\Omega = -PV = -\theta\ln\left[1 + \xi V + \frac{\xi^2}{2!}\iint e^{-\frac{U_{12}}{\theta}}dr_1dr_2 + \frac{\xi^3}{3!}\iiint e^{-\frac{U_{123}}{\theta}}dr_1dr_2dr_3 + \ldots\right]$$

$$= -\theta\ln\left[1 + \xi V + \frac{\xi^2 V}{2!}\int e^{-\frac{U_{12}}{\theta}}dr_1 + \frac{\xi^3 V}{3!}\iint e^{-\frac{U_{123}}{\theta}}dr_2dr_3 + \ldots\right] =$$

$$= -\Theta V\left[\left(\xi - \frac{\xi^2}{\pi}\int e^{-\frac{U_{12}}{\Theta}} dN_2 + \frac{\xi^3}{3}\iint e^{-\frac{U_{12}+U_{13}}{\Theta}} dN_2\, dN_3\right) - \frac{1}{2}\left(\ldots\right)^2 - \frac{1}{3}\left(\ldots\right)^3\right]$$

$$P = \Theta \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_n}{n!}\xi^n$$ – давление

$J_1 = 1$

$J_2 = \int\left(e^{-\frac{U_{12}}{\Theta}} - 1\right) dN_2$

$J_3 = \iint\left(e^{-\frac{U_{12}}{\Theta}} - e^{-\frac{U_{13}}{\Theta}} - e^{-\frac{U_{23}}{\Theta}} + 1\right) dN_2\, dN_3$

ур. состояния связывает объем, давление и температуру

$$N = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T,V}$$

$$\frac{\partial P}{\partial \mu} = \frac{1}{\Theta}\xi \qquad N = V\left(\frac{\partial P}{\partial \mu}\right)_{T,V} = V\sum_{n=1}^{\infty}\frac{J_n}{(n-1)!}\xi^n$$

плотность в ур-е

$$N = V\sum_{n=1}^{\infty}\frac{J_n}{(n-1)!}\xi^n$$

$$P = \Theta\sum_{n=1}^{\infty}\frac{J_n}{n!}\xi^n$$

$n = 1$ $\begin{cases} P = \Theta\xi \\ N = V\xi \end{cases} \Rightarrow \xi = \frac{N}{V} = \frac{P}{\Theta} \rightarrow \boxed{P = \frac{\Theta N}{V}} = \frac{T k_B N}{V}$

$n = 2$ $\begin{cases} P = \Theta\left(\xi + \frac{J_2}{2}\xi^2\right) \\ N = V\left(\xi + J_2\xi^2\right) \end{cases} \Rightarrow P = \Theta\frac{N}{V}\left(1 - \frac{N}{2V}J_2\right)$

$B = -\frac{1}{2}J_2$

1.04 2013г

Термодинамика плазмы. Метод Дебая-Хюккеля

Z_a

n_a

$\sum Z_a e\, n_a = 0$ – условие квазинейтр-ти*

$\frac{(Z_a e)^2}{r} \ll T$ – идеальная плазма

$r = \left(\frac{1}{n}\right)^{1/3}$

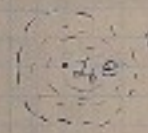
$n^{1/3}(Z_a e)^2 \ll T$ → можно почти всюду делать вывод плазмы.

$n \ll \left(\frac{T}{Z_a e^2}\right)^3$

↳ хорошо вып-ся в области высоких темп-р

Заметим, что наши ионы корреляционны м/у собой – зависят друг от друга. Динамика будет зависеть от энергии корреляции. Чтобы найти $E_{корр}$ используем метод Дебая-Хюккеля.

Зафиксируем ион у которого заряд $Z_i e$ и он образует некоторый шар в котором находятся другие ионы, которые образуют облако другого сорта.



$n_a(r)$ · энергия ионов сорта a в поле $\Rightarrow Z_a e\varphi$

· распред ионов будет подчиняться распр. Больцмана

$$n_a(r) = C_a e^{-\frac{Z_a e\varphi}{k_B T}} = n_a e^{-\frac{Z_a e\varphi}{k_B T}}$$

$E = -\operatorname{grad}\varphi$

Запишем ур. Лапласа в виде: $\Delta\varphi = -4\pi e\sum Z_a n_a$ = (компенсир. ж большие ионы → можем разложить)

$$= -4\pi e\sum_a Z_a n_a\left(1 - \frac{Z_a e\varphi}{k_B T}\right)$$

↳ из с. вып-ся для квазинейтр*

$$\Delta\varphi - 4\pi e^2\sum_a \frac{Z_a^2 n_a}{k_B T}\varphi = 0, \quad \varkappa^2 = 4\pi e^2\sum_a \frac{Z_a^2 n_a}{k_B T} = \frac{1}{r_D^2}$$

$\Delta\varphi - \varkappa^2\varphi = 0$ → решение уравн. → решение на как на Кулоновский потенциал $\frac{Ze}{r}$

$$\rightarrow \varphi = C\frac{e^{-\varkappa r}}{r} = \frac{Z_i e}{r}e^{-\varkappa r}$$

потенциал с учетом его влияния на другие

$$\varphi = \frac{Z_i e}{r}\left(1 - \varkappa r + \frac{1}{2}\varkappa^2 r^2\right) = \frac{Z_i e}{r} - Z_i e\varkappa + \frac{1}{2}Z_i e\varkappa^2 r^2$$

← поправки

потенциал создаваемый ионами в месте где пр. нахо. ион ион $Z_a e$, заряд облака

$$E_{корр} = \frac{1}{2}\sum_a e Z_a n_a \varphi_a$$

подставляем $\beta \to$

$E_{кул.} = -\frac{1}{2}\sum_a (eZ_a)^2 n_a \mathcal{X} \to$ подставляем $\mathcal{X} \to$

$E_{кул.} = -\frac{1}{2} V \sum_a (eZ_a)^2 n_a \sqrt{\frac{\sum_a kTe^2 Z_a^2 n_a}{kT}} =$

↳ энергия взаимод. ионов в плазме

$= -\frac{1}{2} V (kT)^{1/2} \frac{\left(\sum_a (eZ_a)^2 n_a\right)^{3/2}}{\sqrt{k_B T}}$

Чтобы найти ур. состояния, нужно знать своб. энергию (через Гиббса-Гельмгольца).

$E = TS + F$

$E = F - T\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V$

$\frac{E}{T^2} = \frac{F}{T^2} - \frac{1}{T}\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = -\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{F}{T}\right) \Rightarrow$

$\Rightarrow F = -T\int \frac{E}{T^2}\, dT$

$\int dT \frac{1}{(T^2)^{1/2}} = -\frac{2}{3} T^{-3/2}$

$F = F_{ид} - \frac{2}{3}\frac{V}{2}(kT)^{1/2}\frac{\left(\sum_a (eZ_a)^2 n_a\right)^{3/2}}{T^{3/2}\sqrt{k_B}} T =$

число ионов сорта a $N_a = V \cdot n_a$

$= F_{ид} - \frac{2}{3}\pi^{1/2}\frac{\left(\sum_a (eZ_a)^2 N_a\right)^{3/2}}{\sqrt{VT}}$, $N = \sum_a N_a$

$$\boxed{P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = \frac{NT}{V} - \frac{2}{3}\pi^{1/2}\frac{\left(\sum_a (eZ_a)^2 N_a\right)^{3/2}}{V^{3/2}\, T^{1/2}}}$$

↳ ур. состояния для плазмы

If сист. заключена – микроканон. распр
If в контакте с термост. – канонич. распр
If в конт. с термост. и резерв. частиц – большое канон.

Рассм случай, когда сила взаимодействия (будем увелич β, уменьшать T)

- в сист. сбу включим слабое тепловое отклонение, который всегда. Гейзенберга пр-ву

Чуть-чуть лучше в $|a\rangle$ – сбе!
$\langle a|$ – бра векторы!

- Если всегда сам, как действуем в линейном пр-ве;

$|a\rangle^* = \langle a|$

Лин пр-во – задаем с помощью операции сложения и умножения на а сбе векторов

$|a\rangle + |b\rangle = |b\rangle + |a\rangle$
$|a\rangle + |a\rangle = |b\rangle + |a\rangle$
$1\,|a\rangle = |a\rangle$
$(\alpha\beta)|a\rangle = \alpha|\beta a\rangle$
$\alpha(|a\rangle + |b\rangle) = \alpha|a\rangle + \alpha|b\rangle$
$(\alpha+\beta)|a\rangle = \alpha|a\rangle + \beta|a\rangle$

Для комплекс. → Введем понятие скалр. произв.

$\forall |a\rangle, |b\rangle \in H$, $\langle a|b\rangle \in \mathbb{C}$, если удовл. 4 аксиомам:

1. $\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^*$
2. $(\langle a| + \langle b|)|c\rangle = \langle a|c\rangle + \langle b|c\rangle$
3. $(\alpha\langle a|b\rangle) = \alpha\langle a|b\rangle$
   $\langle a|\alpha|b\rangle = \alpha\langle a|b\rangle$
4. $\langle a|a\rangle \geq 0$
   $|a\rangle = |0\rangle$

$\langle a|b\rangle = 0$ $\Rightarrow \langle n|m\rangle = \delta_{nm} = \begin{cases} 1, & n = m \\ 0, & n \neq m \end{cases}$

Условие полноты: $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$
Любая волна может быть разложена в виде ряда $\sum_n \alpha_n |n\rangle$

$\forall a \in H$

$$\langle m|\,|a\rangle = \sum_n C_n |n\rangle$$

$$\langle m|a\rangle = \sum_n C_n \delta_{nm} = C_m$$

$\Psi_a(\beta) = \langle \beta|a\rangle$
$\Psi_a(E) = \langle E|a\rangle$

опер Гамильтона мы Эрмитовы $\Rightarrow \hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$

$$|a\rangle = \sum_n C_n|n\rangle = \sum_n \langle n|a\rangle|n\rangle$$

$\Psi_a(E) = \langle n|a\rangle$ волновая ф в энерг представл.

3.04.13 $\hat{G}^+$ - эрмитов оператор

$\hat{G}^+ = (\hat{G}^*)^T = (\hat{G}^T)^*$

$|a\rangle^+ = \langle a|$

$H = \{|a\rangle\}$ - мн-во сост-векторов

Определение собств вектора и собств знач. →

→ $\hat{G}|g\rangle = g|g\rangle \qquad g^* = g$

В координатном представл.

$\langle \vec{r}|\vec{r}'\rangle = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$

$\bar{G} = \langle a|\hat{G}|a\rangle$ - ср. знач. наблюд. величины

$|a\rangle \in H$ - чистое состояние

Введем оператор проектирования:

$\hat{P}_{[|b\rangle]} = |b\rangle\langle b|$ (обозначим полным проектор дает возможность найти $\bar{b}$ - ср. знач. опер $\hat{b}$)

$\hat{P}_{[|b\rangle]}|a\rangle = |b\rangle\langle b|a\rangle$

$\langle a|a\rangle = 1$

Будем работать мы мн-м собств векторов опер Гамильтона:

$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ - состояние состоит от номера и энергии

У всякого состояния можно представить в виде линейной комбинации базис векторов $\{|n\rangle\}$

Полный набор - такой набор векторов, в котором мы можем представить любой вектор в виде линейной комбинации остальных векторов

$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$ - условие полноты

$Sp\,\hat{G} = \sum_n \langle n|\hat{G}|n\rangle$
↳ сумма матрич элем оп

Покажем, что можно представ. $\bar{G} = Sp\,\bar{G}\hat{P}_{[a]}$

$\sum_n \hat{P}_{[|n\rangle]} = 1 \quad , \quad \hat{P}_{[|a\rangle]} = |a\rangle\langle a|$

$$\sum_n \langle n|\hat{G}\hat{P}_{[|a\rangle]}|n\rangle = \sum_n \langle n|\hat{G}|a\rangle\langle a|n\rangle = Sp\,\hat{P}_{[|a\rangle]}\hat{G}$$

$$= \sum_n \langle a|\underbrace{n\rangle\langle n}_{\text{из усл полноты } = 1}|\hat{G}|a\rangle = \langle a|\hat{G}|a\rangle$$

Можно ввести понятие смешанного (перемен по) состояния: сост в котором вектор с мн-ем наблюдается с вероятностью w_i

$\{|\psi_i\rangle\} \quad , \quad w_i > 0 \quad , \quad \sum_i w_i = 1$

$\sum_i w_i|\psi_i\rangle \notin H$ - смеш сост

$|\nu_1\rangle, \quad |\nu_2\rangle, \quad \ldots, \quad |\nu_p\rangle$

$w_{\nu_1} \quad w_{\nu_2} \quad w_{\nu_p} \quad \sum_{i=1}^{p} w_{\nu_i} = 1$

$\bar{G} = \sum_{\nu} w_\nu \langle\nu|\hat{G}|\nu\rangle$ – наблюд. значение для ансамбля систем в смеш. состоянии

Статистический оператор

$$\hat{\rho} = \sum_{\nu} |\nu\rangle w_\nu \langle\nu|$$

$\bar{G} = Sp(\hat{G}\hat{\rho}) = Sp(\hat{\rho}\hat{G}) = \sum_n \langle n|\hat{\rho}\hat{G}|n\rangle =$

$= \sum_n \sum_\nu \langle n|\nu\rangle w_\nu \langle\nu|\hat{G}|n\rangle = \sum_\nu \left(\sum_n w_\nu \langle\nu|\hat{G}\underbrace{|n\rangle\langle n|}_{=\hat{E}}|\nu\rangle\right) =$

$= \sum_\nu w_\nu \langle\nu|\hat{G}|\nu\rangle = \bar{G}$

$$\bar{G} = Sp\,\hat{\rho}\hat{G}$$

$|Q\rangle^+ = \langle Q|$

Св-ва смеш. оператора

1. Является эрмитовым: $\hat{\rho}^+ = \hat{\rho}$

$\Delta \left(\sum_\nu w_\nu |\nu\rangle\langle\nu|\right)^+ = \left(\sum_\nu w_\nu \langle\nu||\nu\rangle\right)^+ =$

$= \sum_\nu w_\nu^* |\nu\rangle\langle\nu| = \sum_\nu |\nu\rangle w_\nu \langle\nu|$ ▲

2. $Sp\,\hat{\rho} = 1$

$\Delta\ Sp\,\hat{\rho} = \sum_n \langle n|\sum_\nu |\nu\rangle w_\nu \langle\nu|n\rangle =$

$= \sum_\nu \sum_n w_\nu \langle\nu|\underbrace{|n\rangle\langle n|}_{=\hat{E}}|\nu\rangle = \sum_\nu w_\nu \langle\nu|\hat{E}|\nu\rangle = \sum_\nu w_\nu = 1$ ▲

3. $\rho_{nm} = \delta_{nm} \quad (\langle n|m\rangle = \delta_{nm})$

$\hat{\rho} = \hat{P}_{[a_n]}$

Смеш. оператор для чистого состояния совпадает с опер. проектирования.

$\hat{\rho} = \sum_\nu w_\nu |\nu\rangle \underbrace{\langle\nu|}_{1} = 1$

4. $\hat{P}^+_{[a_n]} = \hat{P}_{[a_n]}$

$\Delta\ \hat{P}^+_{[a_n]} = |a\rangle \underbrace{\langle a|a\rangle}_{=1} \langle a| = \hat{P}_{[a_n]}$ ▲

$\hat{\rho}^+ \neq \hat{\rho}$ – смеш. в состояние

$\hat{\rho}^+ = \hat{\rho}$ – чистое состояние

Найдем ур-е, которому подчиняется смеш. опер. Запишем ур. Шр-ра для вх-а и сопр. вектора

$$\begin{cases} i\hbar \dfrac{\partial|\nu\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\nu\rangle \\ -i\hbar \dfrac{\partial\langle\nu|}{\partial t} = \langle\nu|\hat{H}^+ = \langle\nu|\hat{H} \end{cases}, \quad \text{т.к. } \hat{H}^+ = \hat{H}$$

8.04.13

$i\hbar \dfrac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = i\hbar \sum_\nu w_\nu \left(\dfrac{\partial|\nu\rangle}{\partial t}\langle\nu| + |\nu\rangle \dfrac{\partial\langle\nu|}{\partial t}\right) =$

$= \sum_\nu w_\nu (\hat{H}|\nu\rangle\langle\nu| - |\nu\rangle\langle\nu|\hat{H}) = \hat{H}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{H} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}]}$$ – ур. Лиувилля, Фон Неймана

↳ аналог ур. Лиувилля

Мы хотим найти смеш. оператор, который сам сост. т.е. равновесия

$\dfrac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = 0 \Rightarrow [\hat{H}, \hat{\rho}] = 0 \rightarrow \hat{\rho} = \hat{\rho}(\hat{H})$ – стационарный смеш. опер.

$\hat{\rho}, \hat{H}$ – имеют общий набор собств. векторов $\Rightarrow$

$\Rightarrow$ одновременно могут быть диагональны.

Смеш. оператор должен быть функцией гамильтониана.

$\hat{\rho} = \sum_\nu |\nu\rangle w_\nu \langle\nu| = \sum_\nu w_\nu \hat{P}_{[\nu]}$ – опер. проектир.

Пусть на пучок поляризованного света оказывает фильтр:

Введем вектора поляризации:
(пусть свет распр-ся вдоль оси z)

$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = |0°\rangle$ — $0x$

$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = |90°\rangle$ — $0y$

Если свет с поляризацией на угол $|\alpha\rangle$ можем представить в виде линейной комбинации:

$$|\alpha\rangle = \alpha\underbrace{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}}_{\text{линейн. поляр.}} + \beta\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix}$$

$$\hat{P}_{[\alpha]} = |\alpha\rangle\langle\alpha| = \begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha^* & \beta^*\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\alpha\alpha^* & \alpha\beta^*\\ \beta\alpha^* & \beta\beta^*\end{pmatrix} \ (=)$$

Знаем, что $Sp\ \hat{P}_{[\alpha]} = 1 \Rightarrow$ угол, соотв. поляризации

$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, $\alpha = \cos\varphi$, $\beta = \sin\varphi$

$$(=)\begin{pmatrix}\cos^2\varphi & \cos\varphi\sin\varphi\\ \cos\varphi\sin\varphi & \sin^2\varphi\end{pmatrix}$$

if $\varphi = 30 \Rightarrow \cos 30° = \sqrt{3}/2$, $\sin 30° = 1/2$

$$P_{[30]} = \begin{pmatrix}3/4 & \sqrt{3}/4\\ \sqrt{3}/4 & 1/4\end{pmatrix}$$

Что представляет <u>смешанная</u> поляр.?

$$\frac{3}{4}|45°\rangle + \frac{1}{4}|30°\rangle = \omega_1|\psi_1\rangle + \omega_2|\psi_2\rangle$$

$$\sum_i \omega_i = 1 \rightarrow \frac{3}{4} + \frac{1}{4} = 1$$

Как найти смешанную матрицу?

$$\omega_1 P_{[\psi_1]} + \omega_2 P_{[\psi_2]} = \frac{3}{4}P_{[45°]} + \frac{1}{4}P_{[30°]} =$$

$$= \frac{3}{4}\begin{pmatrix}1/2 & 1/2\\ 1/2 & 1/2\end{pmatrix} + \frac{1}{4}\begin{pmatrix}3/4 & \sqrt{3}/4\\ \sqrt{3}/4 & 1/4\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}3/8+3/16 & 3/8+\sqrt{3}/16\\ 3/8+\sqrt{3}/16 & 3/8+1/16\end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix}9/16 & 6+\sqrt{3}/16\\ 6+\sqrt{3}/16 & 7/16\end{pmatrix} = \frac{1}{16}\begin{pmatrix}9 & 6+\sqrt{3}\\ 6+\sqrt{3} & 7\end{pmatrix}$$

$$\bar{G} = Sp\ \hat{P}_{[\alpha]}$$

Ансамбль Гиббса — мн-во не мех. систем (пучок) каждая из которых мех-ся в своем смешанном состоянии, которое опред-ся матрицей $\hat{\rho}$ — определяет макросост.

ансамбль с микропарам. E, V, N — микроканон.
T, V, N — канон.
T, V — большой канон. ансамбль Гиббса

Постулаты:

1. Для св. мех. сист. одну micro состояние — $\hat{\rho}$ равновесн. $\hat{\rho}$ имеет одну величину мало отлич. от нуля. $\bar{G}_a$

2. <u>а priori</u>: все сист. мех. св. в своем смешанном состоянии, мы не различ-ли их

3. <u>а posteriori</u>: фазы, соотв. всем сист. смешанным мы случайными

Теперь всю работу с тем микроканон. ансамблем Гиббса

$$\hat{\rho}(\hat{H}) = \frac{1}{\Omega(E)}\,\delta(E\hat{I}-\hat{H})$$

↳ единичный оператор

Стат. вес найдем из усл. нормировки

$$Sp\,\hat{\rho}(\hat{H}) = 1 \Rightarrow \Omega(E) = Sp\,\delta(E\hat{I}-\hat{H}) =$$

|| в кач. в полного набора возьмем $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ ||

$$= \sum \langle n|\delta(E\hat{I}-\hat{H})|n\rangle \quad \sum_n \delta(E-E_n)$$

↳ сум. по уров. → стат. сумма

✓ отлич. от 0 только если $E = E_n$

Найдем диаг. элем. стат. оператора

$$\langle n|\hat{\rho}(\hat{H})|n\rangle = \boxed{\rho_{nn} = \frac{1}{\Omega(E)}\,\delta(E-E_n)}$$

↳ нл. вер-ти в общем стат. ф-ю

! Диаг. элем. – плотности вер-ти <= Вер. клас. и кв. стат. физики

$$\bar{G} = Sp\,\hat{\rho}(\hat{H})\hat{G} = \sum_n \frac{1}{\Omega(E)}\,\delta(E-E_n)\,\langle n|\hat{G}|n\rangle$$

if т.д. система в контакте с термостатом:

$$\hat{\rho}(\hat{H}) = e^{\frac{F\hat{I}-\hat{H}}{\theta}}, \quad \rho_{nn} = e^{\frac{F-E_n}{\theta}}$$

$$F = -\theta \ln Z, \quad Z = Sp\,e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}} = \sum_n \langle n|e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}}|n\rangle = \sum_n e^{-\frac{E_n}{\theta}}$$

$\rho(x,x') = \langle x|\hat{\rho}|x'\rangle$ – стат. опер. в коорд. представ.

$\hat{\rho}(\hat{H}) = e^{\frac{F\hat{I}-\hat{H}}{\theta}}$ – стат. опер. для большого канон. распр.

$Z = Sp\,e^{\frac{\mu\hat{N}-\hat{H}}{\theta}}$ – большая стат. сумма

*Статист. вес – кол-во кв. сост. ✓ которые имеют заданное значение энергии E

Знаем $\Omega(E)$ можем найти $\Gamma(E)$, и

$S = k_B \ln \Omega(E)$, а знаем энтропию можем найти все вел. т/д парам-ра

10.04.13

- if T, V, N – КАНОНИЧ.

$$\hat{\rho} = e^{\frac{F\hat{I}-\hat{H}}{\theta}}$$

$$Z = \sum_n e^{-\frac{E_n}{\theta}}$$

$$Z = Sp\,e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}} = \sum_n e^{-\frac{E_n}{\theta}}$$

$$F = -\theta \ln Z$$

Стат. вес: $\rho_{nn} = e^{\frac{F-E_n}{\theta}}$

- if T, μ – БОЛЬШОЕ КАНОНИЧ.

$$\hat{\rho} = e^{\frac{\Omega\hat{I}+\mu\hat{N}-\hat{H}}{\theta}}$$

$\hat{N}$ – оператор числа частиц

$$Z = Sp\,e^{\frac{\mu\hat{N}-\hat{H}}{\theta}} = \sum_{N=0}^{\infty}\sum_n e^{\frac{\mu N-E_n}{\theta}}$$

$$\Omega = -\theta \ln Z \qquad \Omega(T,\mu,V)$$

$$\bar{G} = Sp\,\hat{\rho}\hat{G} = \sum_n e^{\frac{F-E_n}{\theta}} G_{nn}$$

Вспомним, что значит фаза случайна (постулат 3)

Однородный ансамбль Гиббса.

$$\rho_{nm} = \rho_n\,\delta_{nm}, \quad \rho_n - \text{const}$$

$$\frac{\partial \rho_{nm}}{\partial t} = 0 \qquad [\hat{H},\hat{\rho}] = 0$$

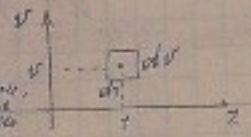
$$\langle n|[\hat{H},\hat{\rho}]|m\rangle = \langle n|(\hat{H}\hat{\rho}-\hat{\rho}\hat{H})|m\rangle =$$

$$= \left\| \text{из усл. полноты: } \sum_p |p\rangle\langle p| = 1 \right\| =$$

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \dfrac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = -\dfrac{\partial H}{\partial q_i} \end{cases}$$

Нужен другой метод!
Мы смотрим он на примере Больцмана, который рассм. движение частиц в ид газе

$\vec{v}_i, \vec{r}_i$
$\dim \mu = 6$



плотн. частиц, при мал. Δr в окр. точки

$dN = f(\vec{v}, \vec{r}, t)\, d\vec{r}\, d\vec{v}$

$\int dN = N = \int f(\vec{v}, \vec{r}, t)\, dr\, dv$

$\omega(\vec{v}, \vec{r}, t) = \dfrac{f(\vec{v}, \vec{r}, t)}{N}$ – плотность вероятности

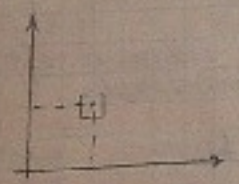
→ вероятности того, что фазовая случай точка мах-ла в точке $\vec{r}$ и имеет скор. $\vec{v}$

$$\int_{\mu} \omega(\vec{v}, \vec{r}, t)\, d\vec{r}\, d\vec{v} = 1$$

Средняя скорость мах-ла как:

$$\bar{\vec{v}} = \int_{\mu} \vec{v}\, \omega(\vec{v}, \vec{r}, t)\, d\vec{r}\, d\vec{v}$$

Гиббс: вм фазовое пр-во – абстрактно.
6N-мерное пр-во ($6N = 2n$; $n = 3N$ – число степ. свободы)
$\dim \Gamma = 6N$



Получим плотность вер-ти:

$\omega(q, p, t) = \dfrac{\rho(q, p, t)\, dp\, dq}{n}$ – хар-ет св-во одной системы

→ вр-ти того, что рассмотрим микроскоп. малую микроскоп.

$$\int_{\Gamma} \omega(p, q, t)\, dp\, dq = 1$$

$$\bar{G}(q, p) = \int_{\Gamma} \omega(q, p, t)\, G(q, p, t)\, dp\, dq \quad (1)$$

Осталось показ, что (1) совпад. с (1)

$$\boxed{G_{наб} = \tilde{G} - \bar{G}}$$

Нужно найти ур-е, которому будет удовлетв. ω:

Св-ва фазового пр-ва:

- с течением времени вер. ансамбля Гиббса будет двигаться по своей траектории. Замкнутый объем пространства будет представлять собой движ. несжимаемой жидкости.

Th Лиувилля: величина 6N мерного фазового объема, занимаемого непрерывной совокуп. фазовых точек в малый момент t не изменяется при их движении

Δ Пусть в мом. времени $t = 0$: Γ_0, $G_0 = \int_{\Gamma_0} dq\, dp$

t: Γ_t $\quad G_t = \int_{\Gamma_t} dq\, dp$

Th Лиувилля говорит $\boxed{G_0 = G_t}$

$G_t = \iint_{\Gamma_t} dq\, dp$ ⊜

перейдем от q, p к p_0, q_0

$t \to q, p$
$q = q(p_0, q_0)$
$p = p(p_0, q_0)$

$$= \sum_p \langle n|\hat{H}|p\rangle\langle p|\hat{\rho}|m\rangle - \sum_p \langle n|\hat{\rho}|p\rangle\langle p|\hat{H}|m\rangle =$$

$$= \sum_p \{ H_{np}\rho_p\delta_{pm} - \rho_p\delta_{np}H_{pm} \} = \rho_n H_{nm} - \rho_n H_{nm} = 0$$

Посмотрим, как „выглядит" стат оператор

$$\hat{\rho} = \sum_\nu |\nu\rangle\, w_\nu \langle\nu| =$$

$$\left\| \begin{array}{l} |\nu\rangle = \sum_n \underbrace{C_n^{(\nu)}}_{\text{коэф. разл. по базису}} |n\rangle \\ C_n^{(\nu)} = \langle n|\nu\rangle \\ \langle\nu| = \sum_m (C_m^{(\nu)})^* \langle m| \end{array} \right\|$$

$$= \sum_m \sum_\nu \sum_n w_\nu C_n^\nu (C_m^\nu)^* \langle m|n\rangle^* = \left\{ \begin{array}{l} \text{меняем местами } n \text{ и } m \\ \text{сопряж. скалярное} \end{array} \right\}$$

$$= \sum_\nu w_\nu \sum_n \sum_m C_n^\nu (C_m^\nu)^* \langle m|n\rangle$$

$$\rho_{nm} = \sum_\nu C_n^\nu (C_m^\nu)^* \delta_{mn}\, w_\nu$$

$$C_n^{(\nu)} = |C_n^{(\nu)}| e^{i\varphi_n}, \quad C_m^{(\nu)*} = |C_m^{(\nu)}| e^{-i\varphi_m}$$

$$|C_n^\nu||C_m^\nu| e^{i(\varphi_n-\varphi_m)} = \cos(\varphi_n-\varphi_m) + i\sin(\varphi_n-\varphi_m) \quad C_n^\nu = \langle n|\nu\rangle$$

$$\sum_\nu w_\nu \cos(\varphi_n-\varphi_m) = \overline{\cos(\varphi_n-\varphi_m)} = 0, \quad n \neq m$$

$$\overline{\sin(\varphi_n-\varphi_m)} = 0, \quad n \neq m$$

$$\sum_\nu w_\nu e^{i(\varphi_n-\varphi_m)} = 0, \quad n \neq m$$

это и значит, что фазы беспорядочны, случайные

Найдем стат оператор.

Получим ур. Блоха

Запишем стат. оп. для канонич. распред.

$$\hat{\rho} = e^{-\frac{H}{\Theta}} \cdot e^{-\beta\hat{H}}, \quad \underbrace{\mathrm{Sp}\,\hat{\rho} = Z}_{\text{стат сумма}}$$

Берем производную по β

$$\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial\beta} = -\hat{H}e^{-\beta\hat{H}} = -\hat{H}\hat{\rho} \rightarrow \boxed{\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial\beta} = -\hat{H}\hat{\rho}}, \quad \hat{\rho}(0) = \hat{1}$$

ур. Блоха

в случае коорд представл. $\langle x|\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial\beta} = -\hat{H}\hat{\rho}|x'\rangle$

$$\frac{\partial\rho(x,x',\beta)}{\partial\beta} = -H_x\rho(x,x',\beta) \quad * \rho(x,x',0) = \delta(x-x')$$

→ нач. усл

Для свободной частицы:

$$H_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial\rho(x,x',\beta)}{\partial\beta} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x,x',\beta)$$ - ур. диффузии (теплопровод-ти)

с нач. усл *

Решение: $\rho(x,x',\beta) = \underbrace{\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{1/2}}_{\text{величина от нормир.} \sim \frac{1}{T}} \exp\left[-\frac{m(x-x')^2}{2\hbar^2\beta}\right]$ - стат оп в коорд представл.

если $x - x' = \Delta x \Rightarrow$

$$\Rightarrow \rho(x,x',\beta) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{m(\Delta x)^2}{2\hbar^2\beta}\right]$$ - распред Гаусса

$$\overline{(\Delta x)^2} = \frac{\hbar^2\beta}{m}$$

Волна де Бройля: $\lambda = \left(\frac{2\pi\hbar^2\beta}{m}\right)^{1/2} \rightarrow$

$$\rightarrow \overline{(\Delta x)^2} = \lambda^2/2\pi$$

$$\rho(\vec{r},\vec{r}',\beta) = \left(\frac{1}{2\pi\overline{(\Delta r)^2}}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{(\Delta\vec{r})^2}{(\Delta r)^2}\right]$$

Парамагнетизм Паули.

Рассм. газ состоящ. из N частиц, нах-ся в объеме V в магн. поле $\vec{H}$, со спином $S = \frac{1}{2}$. Частицы не взаимод.

$\hat{H} = -\mu_Б \hat{\sigma} \vec{H}$

$\mu_Б = \frac{e\hbar}{2mc}$

$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$

$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

$\sigma_x^2 = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

рассм. случай, когда маг. поле направлено вдоль оси z.

$\hat{H} = -\mu_Б \sigma_z H$

запишем стат. оператор в виде

$\hat{\rho} = \frac{\exp[\mu_Б \sigma_z H/\theta]}{Z}$, $Z = Sp\, e^{\frac{\mu_Б \sigma_z H}{\theta}}$

$M = \frac{N}{V} \bar{\mu}$

$\bar{\mu} = \mu_Б Sp\, \hat{\rho} \sigma_z = \mu_Б \frac{Sp\, \sigma_z e^{\frac{\mu_Б \sigma_z H}{\theta}}}{Sp\, e^{\frac{\mu_Б \sigma_z H}{\theta}}}$

ср. знач. маг. мом.

$\sigma_z e^{\frac{\mu_Б \sigma_z H}{\theta}} = \sigma_z \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\mu_Б \sigma_z H}{\theta}\right)^n$

25.04.
МОЗ =

$e^{\frac{\mu_Б \sigma_z H}{\theta}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\mu_Б H}{\theta}\right)^n \sigma_z^n =$

$= \sum_p \left(\frac{1}{(2p)!} \left(\frac{\mu_Б H}{\theta}\right)^{2p}\right) I + \sum_p \frac{1}{(2p+1)!} \left(\frac{\mu_Б H}{\theta}\right)^{2p+1} \sigma_z =$

$= Ch\left(\frac{\mu_Б H}{\theta}\right) I + Sh \frac{\mu_Б H}{\theta} \sigma_z$

подставляем

$\bar{\mu} = \mu_Б \frac{Ch \frac{\mu_Б H}{\theta} Sp\, \sigma_z + Sh \frac{\mu_Б H}{\theta} Sp\, I}{Ch \frac{\mu_Б H}{\theta} Sp\, I + Sh \frac{\mu_Б H}{\theta} Sp\, \sigma_z} = \left\| \begin{matrix} Sp\, \sigma_z = 0 \\ Sp\, I = 2 \end{matrix} \right\|$

$= \mu_Б\, th \frac{\mu_Б H}{\theta}$

$M = n \bar{\mu} = n \mu_Б\, th(\mu_Б H/kT)$

$\frac{\mu_Б H}{kT} \ll 1$

$\boxed{M = \frac{n \mu_Б^2 H}{kT}}$ – полная магн. мом. газа в сл. высокой температуры

По аналогии с отрицательной энергией в пос. случае, в квантовом (по фон Нейману)

$S = -k_Б Sp\, \hat{\rho} \ln \hat{\rho}$, $\hat{\rho}$ – стат. опер.

• If вернемся стат. опер. для микроканонич.

$\hat{\rho} = \frac{1}{\Omega(E)} \delta(E\hat{I} - \hat{H}) = \frac{1}{\Gamma(E)} \delta(E\hat{I} - \hat{H})$

$Sp\, \hat{\rho} = 1 \to \Gamma(E) = \Omega(E) = \sum_n \delta(E - E_n) =$

n – ур. сост.

$n = \{\alpha_n, E_n\}$

$= \sum_{\{\alpha_n\}} \left(\sum_{E_n} \delta(E - E_n)\right) = \sum_{\{\alpha_n, E = E_n\}} 1$

• If стат. опер. для канонич.

$\hat{\rho} = e^{\frac{E\hat{I} - \hat{H}}{\theta}}$

$S = -\theta \sum_n e^{\frac{E - E_n}{\theta}} \ln e^{\frac{E - E_n}{\theta}} = -\theta \sum_n W_n \ln W_n$

$W_n = \rho_{nn} = e^{\frac{E - E_n}{\theta}}$

Квантовые идеальные газы

для клас. газа мы не учитыв. фазы, а сам. ф. из квантовой механ. – фермионы, бозоны

• Ч. газ имеет нечет. спин $S = \frac{1}{2}$ – газ фермионов ⇒

⇒ вам ф. должна менять знак на перестан. ⇒ рез. ст. Паули (в одной и той же ячейке мест-ся не более 1 части)

• If спин четн. $S = p$ – газ бозона

→ вып. ф. знак не меняется.
число частиц > 1

Появилось обмен. взаимод. → приведит к вырождению

Задача. Как опис-ть ид. кв. газ?

Рассм. случай, когда в образце и тем же кв. сост. k может нах-ся малое число частиц

$\bar{n}_k \ll 1$

Эт. газ в виде семьи ж. молекул нах-ся в этом сост. на кол-во этих молекул.

$E = \sum_k \varepsilon_k n_k$ — ж. сост. $k^{го}$ уровня

Обмен. взаимод. связано с перестановкой частиц.

Такой ид. кв. газ наз-ся Больцмановским.

Большинство операторов можно брать одновр. измеримыми, т.к. они имеют вторый набор. Смена величин

$\bar{n}_k = a e^{-\varepsilon_k/\theta}$ — кол-во молек. на уровне ε_k, кол. мол-л на сост.

$\sum_k \bar{n}_k = N$ — полное число частиц

$\Omega = \sum_k \Omega_k$

$W_{n_k} = \exp\left[\frac{\Omega_k + \mu n_k - \varepsilon_k n_k}{\theta}\right] = \exp\left[\frac{\Omega_k + n_k(\mu - \varepsilon_k)}{\theta}\right]$

Хотим найти ср. число заполнения $k^{го}$ ж. уровня

if $n_k = 0 \Rightarrow W_0 = \exp\frac{\Omega_k}{\theta} \sim 1$

if $n_k = 1 \Rightarrow W_1 = \exp\left[\frac{\Omega_k + (\mu - \varepsilon_k)}{\theta}\right] \sim e^{\frac{\mu - \varepsilon_k}{\theta}}$

$W_{2,3,4} \ll 1$

$\bar{n}_k = \sum_{n_k=0}^{\infty} W_{n_k} n_k = 0 \cdot W_0 + 1 \cdot W_1 + \ldots + W_2$

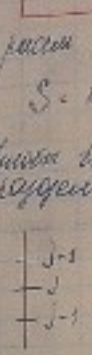
$\boxed{a = e^{\mu/\theta}}$

$\boxed{\bar{n}_k = \exp[(\mu - \varepsilon_k)/\theta]}$ — распр. Больцмана

рассм. неравновесный ид. Больцмановский газ

$S = k_B \ln \Delta\Gamma$

Чтобы вычислить стат. вес → нужно сначала разделить на области.



$G_j \gg 1$
$N_j \gg 1$

$\Delta\Gamma = \prod_j \Delta\Gamma_j$, $S = k_B \sum_j \ln \Delta\Gamma_j$, $\bar{n}_j = \frac{N_j}{G_j} \ll 1$

Кол-во способов размещения N_j молекул по G_j уровням:

$G_j^{N_j} \frac{1}{N_j!} = \Delta\Gamma_j$ $\boxed{\Delta\Gamma_j = \frac{1}{N_j!} G_j^{N_j}}$

исп. концепт. прим.

$S = k_B \sum_j \ln \frac{G_j^{N_j}}{(N_j)!} = k_B \sum_j [N_j \ln G_j - \ln(N_j!)] \Leftrightarrow$

ф. Стирлинга: $\ln N_j! = N_j(\ln N_j - 1) = N_j \ln e N_j$

$\Leftrightarrow k_B \sum_j \frac{N_j}{G_j}(\ln G_j - \ln e N_j) G_j = k_B \sum_j G_j \bar{n}_j (\ln \bar{n}_j - 1)$

$N = \sum_j N_j = \sum_j G_j \bar{n}_j$ (1)

$E = \sum_j \varepsilon_j N_j = \sum_j G_j \varepsilon_j \bar{n}_j$ (2)

Для ★ в сост. т.д. равновесия имеем max => => найдем ср. число заполненных с дан. энергиями (1) и (2). Решим эту задачу можно с пом. метода неопред. множителей Лагранжа.

$$\delta(S + \alpha N + \beta E) = 0 \text{ - ф. Лагранжа}$$

$$\delta(S + \alpha N + \beta E) = \sum_j G_j(\ln \bar{n}_j + 1 + \alpha + \beta \varepsilon_j)\,\delta n_j = 0$$

Это выраж. = 0, когда коэф., стоящий перед вариацией = 0.

$$\alpha n_j + \alpha + \beta \varepsilon_j = 0 \Rightarrow \bar{n}_j = e^{-\alpha - \beta \varepsilon_j}$$

Из соотнош. Гиббса: $dE = TdS + \mu dN$, $dS = -\alpha dN - \beta dE$ } сравниваем => (найдем α и β)

$$\Rightarrow dE = \frac{1}{\beta k_B} dS - \frac{\alpha}{\beta k_B} dN \Rightarrow \beta = \frac{1}{\theta};\ \alpha = -\frac{\mu}{\theta}$$

$$\boxed{\bar{n}_j = e^{\frac{\mu - \varepsilon_j}{\theta}}}$$ - ровн. Больц.

17.04.13 Можем теперь найти своб. эн.:

$$F = -\theta \ln Z = -\theta k_B \sum_k e^{-\varepsilon_k/\theta}; \quad Z = \sum_k e^{-H_i/\theta}$$

$$e^{-\varepsilon_k/\theta} = e^{(\mu - \varepsilon_k)/\theta}$$

$$\sum_{\{n\}} e^{-\frac{E}{\theta}} = \left(\sum_{\{k\}} e^{-\varepsilon_k/\theta}\right)^{N}$$ ← как во макроуст.

{n} - св. сист. газа, как целого; {k} - св. числа одной молекулы

$$\boxed{F = -\theta N \ln\left(\sum_k e^{-\frac{\varepsilon_k}{\theta}}\right)}$$ - св. энергии Больцман-го газа (сумм. по св. сост. каждой молек.)

Случай, когда газ не слишком разреж-й, темп-ра в одном и том же сост. $\bar{n}_j \sim 1$

• if $S = \frac{2P+1}{2}$ (фермионы)

$n_k = 0; 1$

• if $S = P$

$n_k = 0; 1; 2; 3$

ОБМЕННОЕ ВЗАИМОД-Е

• в одном и том же св. сост. можем нах-ся любое число частиц (только для бозонов)

$$\Lambda_k = -\theta \ln\left[\sum_{n_k} e^{\frac{(\mu - \varepsilon_k) n_k}{\theta}}\right], \quad N = \sum_k n_k$$

$$E = \sum_k n_k \varepsilon_k$$

• для фермионов

$$\Lambda_k = -\theta \ln\left(\sum_{n_k = 0,1} e^{\frac{(\mu - \varepsilon_k) n_k}{\theta}}\right) = -\theta \ln\left(1 + e^{\frac{\mu - \varepsilon_k}{\theta}}\right)$$

$$\bar{n}_k = -\left(\frac{\partial \Lambda_k}{\partial \mu}\right)_T$$

$$\bar{n}_k = \theta \frac{1}{e^{\frac{\mu - \varepsilon_k}{\theta}} + 1} e^{\frac{\mu - \varepsilon_k}{\theta}} \cdot \frac{1}{\theta}$$

$$\boxed{\bar{n}_k = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_k - \mu}{\theta}} + 1}}$$ - распр. Ферми Дирака

• для бозонов

$$\Lambda_k = -\theta \ln \sum_{n_k = 0}^{\infty} e^{\frac{(\mu - \varepsilon_k) n_k}{\theta}}$$

← сх. сл. тела знам. если пред. $\ll 1$ => => нужно, чтобы сум. мож. быт. "

Или химпотенциал должен быть отрицат-м!

$$\boxed{\mu < 0}\ !$$

Явл. Бозе-конденсации -

сумма => убывает если прогресс. =>

$$\Lambda_k = -\theta \ln \frac{1}{\left(1 - e^{\frac{\mu - \varepsilon_k}{\theta}}\right)} = \theta \ln\left(1 - e^{\frac{\mu - \varepsilon_k}{\theta}}\right)$$

$$\bar{n}_k = -\theta \frac{-1}{1 - e^{\frac{\mu - \varepsilon_k}{\theta}}} e^{\frac{\mu - \varepsilon_k}{\theta}} \frac{1}{\theta}$$

$$\boxed{\bar{n}_k = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_k - \mu}{\theta}} - 1}}$$ - распр. Бозе-Эйнштейна

при $e^{\frac{\varepsilon_0-\mu}{\theta}} \gg 1$ => оба распределения переходят в распределение Максвелла

• ε_0

$j+1$ $\quad G_j \gg 1$

j $\quad N_j \gg 1$ $\quad$ <= для фермионов

$j-1$ $\quad N_j \ll G_j$

$S = k_B \ln \Delta\Gamma$; $\Delta\Gamma = \prod_j \Delta\Gamma_j$

G_j уровней можно распред м/у N_j частицами (число сочетаний)

$$\Delta\Gamma_j = \frac{G_j!}{N_j!\,(G_j-N_j)!}$$

$$S = k_B \sum_j \left[\ln G_j! - \ln N_j! - \ln (N_j-G_j)!\right] = \sum_j \left[\ln N! - N_j(-1+\ln N_j)\right] =$$

$$= k_B \sum_j \left[G_j(\ln G_j - 1) - N_j(\ln N_j - 1) - (-N_j+G_j)(\ln(-N_j+G_j) - 1)\right] =$$

$$= k_B \sum_j G_j \left[\ln G_j - 1 - \bar{n}_j(\ln N_j - 1) - (-\bar{n}_j+1)(\ln G_j + \ln(-\bar{n}_j+1) - 1)\right] =$$

$$= k_B \sum_j G_j \left[\ln G_j - 1 - \bar{n}_j \ln N_j + \bar{n}_j + \bar{n}_j(\ln G_j + \ln(-\bar{n}_j+1) - 1) - \right.$$

$$\left. - \ln G_j - \ln(-\bar{n}_j+1) + 1\right]$$

$$S = -k_B \sum_j G_j \left[+(1-\bar{n}_j)\ln(1-\bar{n}_j) + \bar{n}_j \ln \bar{n}_j\right]$$

Составим ф. Лагранжа

$$\sum_j G_j \left[(1-\bar{n}_j)\ln(1-\bar{n}_j) - \bar{n}_j \ln \bar{n}_j + \alpha \bar{n}_j - \beta \varepsilon_j \bar{n}_j\right]$$

варьируем это выраж. по $\bar{n}_j$ =>

$$\Rightarrow \delta\left(\sum_j G_j \left[\qquad\qquad\right]\right) = 0$$

$$\sum_j G_j \delta\bar{n}_j \left[\ln(1-\bar{n}_j) + \frac{(1-\bar{n}_j)}{(-\bar{n}_j)} - \ln \bar{n}_j - 1 + \alpha + \beta\varepsilon_j\right] = 0$$

$$\ln \frac{1-\bar{n}_j}{\bar{n}_j} + \alpha + \beta\varepsilon_j = 0 \rightarrow \frac{1-\bar{n}_j}{\bar{n}_j} = e^{-\alpha-\beta\varepsilon} \qquad \alpha = \frac{\mu}{T}$$

$$1-\bar{n}_j = \bar{n}_j e^{-\alpha-\beta\varepsilon} \qquad \beta = \frac{1}{T}$$

$$\boxed{\bar{n}_j = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/\theta}+1}} \qquad \boxed{\bar{n}_j = \frac{1}{1+e^{-\alpha-\beta\varepsilon_j}}}$$

• для бозонов

Найдем Γ_j - ?

(вся лишки => сплошные лишки одеяла полосками)

1 2 3 4

0 | 0 0 0 0 | 0 0 0 0 0

$\underbrace{G_j - 1}_{\text{пр. пр.}} + N_j$ => размещ. „шариков" => число сочет.

$G_j \gg 1$ $\qquad \bar{n}_j = \frac{N_j}{G_j}$

$$\Delta\Gamma_j = \frac{(N_j+G_j-1)!}{(G_j-1)!\,N_j!}$$

$$S = k_B \sum_j \left[\ln (N_j+G_j-1)! - \ln (G_j-1)! - \ln N_j!\right] =$$ исп. ф. Стирлинга

$$= k_B \sum_j \left[(N_j+G_j)(\ln(N_j+G_j)-1) - G_j(\ln G_j - 1) - N_j(\ln N_j - 1)\right] =$$

$$= k_B \sum_j G_j \left[(\bar{n}_j+1)(\ln G_j + \ln(\bar{n}_j+1) - 1) - \ln G_j - 1 - \bar{n}_j(\ln N_j - 1)\right]$$

правит бер

$$S = k_B \sum_j \left[(G_j+N_j)[\ln(G_j+N_j)-1] - N_j(\ln N_j - 1) - G_j(\ln G_j - 1)\right]$$ 11.04.13

$$= k_B \sum_j G_j \left[(1+\bar{n}_j)(\ln G_j - \ln(1+\bar{n}_j) - 1) - \bar{n}_j(\ln N_j - 1) - \ln G_j + 1\right] =$$

$$= k_B \sum_j G_j \left[(1+\bar{n}_j)\ln(1+\bar{n}_j) - \bar{n}_j \ln \bar{n}_j\right]$$

$$N = \sum_j G_j \bar{n}_j \ , \quad E = \sum_j G_j \bar{n}_j \varepsilon_j$$

$$\delta(S - \alpha N - \beta E) = \sum_j G_j \left[k_B \left(\ln(1+\bar{n}_j) + 1 - \ln \bar{n}_j - 1 \right) + \alpha + \beta \varepsilon_j \right] \delta \bar{n}_j = 0$$

$$\frac{\ln(1+\bar{n}_j)}{\bar{n}_j} + \frac{\alpha + \beta \varepsilon_j}{k_B} = 0$$

$$\frac{1+\bar{n}_j}{\bar{n}_j} = e^{-\frac{(\alpha+\beta\varepsilon_j)}{k_B}} \Rightarrow \frac{\bar{n}_j}{\bar{n}_j + 1} = e^{-\frac{\alpha+\beta\varepsilon_j}{k_B}}$$

$$\Rightarrow \bar{n}_j = \frac{e^{-\frac{\alpha+\beta\varepsilon_j}{k_B}}}{1 - e^{-\frac{\alpha+\beta\varepsilon_j}{k_B}}} = \frac{1}{e^{\frac{\alpha+\beta\varepsilon_j}{k_B}} - 1} \qquad \alpha = -\frac{\mu}{T}, \quad \beta = \frac{1}{T}$$

$$\boxed{\bar{n}_j = \frac{1}{\exp(\varepsilon_j - \mu/\theta) - 1}}$$ – распр. Бозе-Эйнштейна

(40) Ферми- и Бозе газы элем. частиц

- Найдем ур. состояния
- стат. – наивероятнейшее распр. ферми – нельзя от Бозе – целый спин
- распр. Ферми-Дирака $C_n = +$ → распр. Бозе-Эйнш. $C_n = -$

Будем считать, что энергия частицы

$$\varepsilon = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$

- Посчитаем кол-во сост. одн. частицы
- Работа пр-ва => объем приходящ. на одно кв. сост. $V = (2\pi\hbar)^3$ =>

$g = 2S + 1$ – число возможн. проекций спина

$$dN = \bar{n}\, \underbrace{g \frac{dp_x\, dp_y\, dp_z\, dV}{(2\pi\hbar)^3}}_{\text{число кв. сост.}}$$ – кол-во частиц, кот. могут сл. в один элем. объем пр-ва

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\theta}} \pm 1}$$

$$dN_p = g\bar{n}V \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{gV}{2\pi^2\hbar^3} \frac{p^2 dp}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\theta}} \pm 1}$$

$\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon$

$$p = \sqrt{2m\varepsilon}$$

$$dp = \frac{\sqrt{2m}}{2\sqrt{\varepsilon}} d\varepsilon$$

$$dN_\varepsilon = g \frac{V 2^{1/2} m^{3/2} \varepsilon^{1/2}}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3 2\sqrt{\varepsilon}} \frac{d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\theta}} \pm 1} \Rightarrow$$

$$dN_\varepsilon = \frac{gV m^{3/2} \sqrt{\varepsilon}\, d\varepsilon}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3 \left(e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\theta}} \pm 1\right)}$$

$$N = \frac{gV m^{3/2}}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon}}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\theta}} \pm 1} d\varepsilon$$ – число частиц

Можно нормировать, ввести безразмерную величину $z = \frac{\varepsilon}{\theta}$

(41) ур. сост.

$$N = \frac{gV(m\theta)^{3/2}}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{z}\, dz}{e^{z - \frac{\mu}{\theta}} \pm 1}$$

мы обязаны ввести хим. потенциал, как ф. темп., объем, числа частиц

Отсюда легко запис. выраж. для энергии

$$dE = \varepsilon \cdot dN_\varepsilon \Rightarrow E = \frac{gV(m\theta)^{3/2}\theta}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{z^{3/2}}{e^{z - \frac{\mu}{\theta}} \pm 1} dz$$

Найдем большой т/д потенциал Гиббса и ур. сост. для газа элем. частиц

$$\Omega = \sum_k \Omega_k = \mp \theta \sum_k \ln\left(1 \pm e^{\frac{\mu - \varepsilon_k}{\theta}}\right) = \left\| \text{для суммы по кв. сост. – } \int \ln \text{ энергии} \right\|$$

(ф. сост.) (бор. сост.)

$$= \mp \frac{gVm^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3} \theta \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} \ln\left(1 \pm e^{\frac{\mu-\varepsilon}{\theta}}\right) d\varepsilon = \left\| \ln \to u,\ \sqrt{\varepsilon}\, d\varepsilon \to dv \right\|$$

$$= \mp \frac{gVm^{3/2}\theta}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3} \left[\frac{1}{3}\varepsilon^{3/2} \ln\left(1 \pm e^{\frac{\mu-\varepsilon}{\theta}}\right) \Big|_0^\infty - \frac{1}{3}\int_0^\infty \varepsilon^{3/2} \frac{e^{\frac{\mu-\varepsilon}{\theta}}}{1 \pm e^{\frac{\mu-\varepsilon}{\theta}}} \frac{1}{\theta} d\varepsilon \right] =$$

$\to 0$

$$= -\frac{2}{3}\left[\frac{gV m^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\int dz\,\frac{z^{3/2}}{e^{z-\frac{\mu}{\theta}}\pm 1}\right] = -\frac{2}{3}E$$

Вспомним: $\Omega = -PV = -\frac{2}{3}E \Rightarrow \boxed{PV = \frac{2}{3}E}$ – точное вы-ж. ур. состояния

где ур.? Ц*

$$\boxed{P = \frac{2}{3}\frac{(m\theta)^{3/2}g}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{z^{3/2}}{e^{z-\frac{\mu}{\theta}}\pm 1}\,dz}$$

для ид. газа $E = \frac{3}{2}N k_B T$

$PV = N k_B T$

$$\Omega = PV = -\frac{2}{3}\frac{V(m\theta)^{3/2}g}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{z^{3/2}\,dz}{e^{z-\frac{\mu}{\theta}}\pm 1} = \theta^{5/2} f\left(\frac{\mu}{\theta}\right)$$

↳ мы ожид. ф. μ и θ порядка $\varepsilon/2$ => если заменим на 2μ и 2θ →

$$\Omega(2\mu, 2\theta) = 2^{5/2}\Omega(\mu,\theta)$$

Число частиц $N = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{V,T}$ => порядка $\frac{3}{2}\left(\frac{\varepsilon}{V}\right)$

$S = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_{V,\mu}$ $\quad \frac{S}{V} \to \frac{3}{2}$

$\frac{S}{N} = \varphi\left(\frac{\mu}{T}\right)$ – ожид. ф. $0^{го}$ порядка

Ф. ожид. ф. μ порядка ε!

• Ур. адиабаты процесс $S = const$

$\frac{\mu}{T} = const$

$\frac{P}{T^{5/2}} = const \Rightarrow PT^{-5/2} = const$

$\frac{S}{V} = \theta^{3/2} f\left(\frac{\mu}{\theta}\right)$

при адиаб. процессе $V \sim \frac{1}{T^{3/2}}$; $T = V^{-2/3}$ =>

$\Rightarrow PV^{5/3} = const$, $\gamma = 5/3$

Адиабата для газа элем. частиц имеет $\gamma = 5/3$

такой же вид как и для ид. газа классич. частиц.

$\gamma = 5/3$ – одно для обоих случаев

Рассмотрим ур. сост., исходя из малости перекрытия:

$e^{\mu/\theta} \ll 1 \Rightarrow$

$$\Rightarrow P = \frac{2}{3}\frac{(m\theta)^{3/2}g}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{z^{3/2}e^{\frac{\mu}{\theta}-z}}{1\pm e^{\frac{\mu}{\theta}-z}}\,dz$$ // разлож. исходного знам. в ряд по μ //

$$= \frac{2}{3}\frac{(m\theta)^{3/2}g}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty z^{3/2}e^{\frac{\mu}{\theta}-z}\left(1\mp e^{\frac{\mu}{\theta}-z}\right)dz = \left\{\begin{array}{l}\int_0^\infty z^{3/2}e^{-z}dz = \\ \mp 2^{-5/2}\int_0^\infty z^{3/2}e^{-2z}dz = \\ \mp 2^{-5/2}\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)\end{array}\right.$$

$$= \frac{2}{3}\frac{(m\theta)^{3/2}g}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\left[e^{\frac{\mu}{\theta}}\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \mp e^{\frac{2\mu}{\theta}}\frac{1}{2^{5/2}}\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)\right] =$$

$$= \frac{2}{3}\frac{(m\theta)^{3/2}g\sqrt{\pi}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\,\frac{e^{\frac{\mu}{\theta}}}{2}\left(1 \mp \frac{e^{\frac{\mu}{\theta}}}{2^{5/2}}\right)$$

$$\Omega = -PV = -g\frac{V(m\theta)^{3/2}\theta}{(2\pi)^{3/2}\hbar^3}e^{\mu/\theta}\left(1 \mp \frac{1}{2^{5/2}}e^{\mu/\theta}\right)$$ 24.04 ДЗ 15.1

$$N = \frac{gV(m\theta)^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty z^{1/2}e^{\frac{\mu}{\theta}-z}\,dz =$$

$$= \frac{gN(m\theta)^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}e^{\mu/\theta}\frac{\sqrt{\pi}}{2}$$ $\quad PV = \frac{2}{3}E$

$$PV = N\theta\left(1 \mp \frac{\pi^{3/2}}{2g}\frac{N\hbar^3}{V(m\theta)^{3/2}}\right)$$

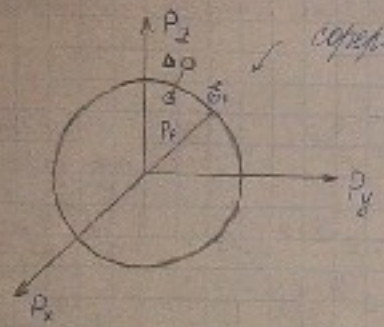
Рассм. случай, когда у нас наложено вырожденный газ e^- (н-р e^- в Al)

$S = 1/2$

$g = (2S+1) = 2$ – вырожд. спина

Пр. Паули: в одном кв. сост. не может нах-ся более 1 частицы

4) Будем класть N-частиц при $T=0$ → заполняют некоторый объем, ограниченный сферой Ферми

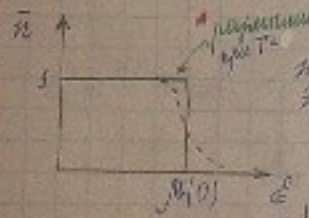


сфера Ферми

$\varepsilon = \frac{P^2}{2m}$ – энергия электрона

* упрощение: в очень узкой области $T \gg T_F$ полностью «размывается»

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\theta}}+1} \underset{T\to 0}{=} \begin{cases} 1, & \varepsilon < \mu(0) \\ 0, & \varepsilon \geq \mu(0) \end{cases}$$



* размытие при T^2

при $T=0$ распред. Ферми-Дирака переходит в ступеньку Ферми

$$\varepsilon_F = \frac{P_F^2}{2m} \qquad P,\ P+dP$$

$$g\frac{V\,4\pi P^2 dP}{(2\pi\hbar)^3}$$ – число ч. состояний в ин-ле $P+dP$

$$N = \int_0^{P_F} gV\frac{4\pi P^2 dP}{(2\pi\hbar)^3} = \int_0^{P_F}\frac{VP^2dP}{\pi^2\hbar^3} = \frac{V}{\pi^2\hbar^3}\frac{P_F^3}{3}$$

$$dE = \varepsilon\frac{VP^2dP}{\pi^2\hbar^3} = \frac{VP^4dP}{2m\pi^2\hbar^3}$$

$$E = \frac{V}{2\pi^2\hbar^3 m}\int_0^{P_F}P^4dP = \frac{VP_F^5}{10\pi^2\hbar^3 m}$$

$$E = \frac{V}{10\pi^2\hbar^3 m}\hbar^5(3\pi^2N)^{5/3}V^{-2/3}$$

$$P = -\frac{\partial E}{\partial V} = \frac{1}{5}\frac{\hbar^2}{\pi^2 m}(3\pi^2N)^{5/3}V^{-5/3} \neq 0$$

$$P_F = \left(\frac{N}{V}3\pi^2\hbar^3\right)^{1/3} = \hbar\left(3\pi^2\frac{N}{V}\right)^{1/3}; \quad P_F \sim \left(\frac{N}{V}\right)^{1/3}$$

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2\left(3\pi^2\frac{N}{V}\right)^{4/3}}{2m} = k_B T_F \Rightarrow$$

$$\Rightarrow T_F = \frac{\hbar^2\left(3\pi^2\frac{N}{V}\right)^{2/3}}{2m k_B} \sim 10\,\frac{10^{-27}\,10^{\frac{27}{2}}}{10^{-16}}\frac{N}{V} \sim 10^{-10} \div 10^{14} \sim$$
$$\sim 10^4 \div 10^5\ K$$

T_F – такая темп-ра, ниже которой наступ. эффекты вырождения

* при $T \to 0$ вырож. газ – дырка → газ сжимается

Сжимаемость (вырожд. ид. газа)

Чем больше плотность газа, тем больше он вырожденный, тем больше упругость

а характ. расст. м/у e^- и ионами

$$a = \sqrt[3]{\frac{V}{N}}$$

для идеальности газа $\frac{Ze^2}{a} \ll \varepsilon_F$

$$Ze^2\left(\frac{N}{V}\right)^{1/3} \ll \frac{\hbar^2\left(3\pi^2\frac{N}{V}\right)^{4/3}}{2m}$$

$$\frac{N}{V} \gg \left(\frac{Ze^2\,2m}{\hbar^2(3\pi^2)^{1/3}}\right)^3$$

(48) Теплоемкость электронного газа

Ферми-газ

$$\Omega = -\frac{1}{3}\frac{gVm^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^{\mu}\frac{\varepsilon^{3/2}d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\theta}}+1}$$

$$I = \int_0^{\mu}\frac{f(\varepsilon)d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\theta}}+1} = \int_0^{\mu}f(\varepsilon)d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}f'(\mu)\theta^2 + \frac{7\pi^4}{360}f'''(\mu)\theta^4$$

$$\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{x-1}}{e^{\varepsilon}+1} = \Gamma(x)\left(1-2^{1-x}\right)\zeta(x)$$

$f(\varepsilon)$ $\varepsilon^{3/2}$

$$\Omega = -\frac{1}{3}\frac{gV m^{3/2}}{2^{3/2}\pi^2\hbar^3}\left(\int_0^\mu \varepsilon^{3/2}d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}\theta^2\frac{3}{2}\mu^{1/2} + \dots\right) =$$

$$= -\frac{1}{3}\frac{gV m^{3/2}}{2^{3/2}\pi^2\hbar^3}\left(\frac{1}{5}\mu^{5/2} + \frac{\pi^2}{4}\theta^2\mu^{1/2}\right) =$$

$$= \Omega_0 - \frac{1}{6}g\frac{V m^{3/2}\theta^2\mu^{1/2}}{2^{3/2}\pi^2\hbar^3}$$

$\theta = k_B T$

Для $\Omega = \Omega(\mu, T, V)$

$F = F(N, T, V) = F_0 - \left(\frac{g\pi}{6}\right)^{2/3}\frac{m}{\hbar^2}N\theta^2\left(\frac{V}{N}\right)^{2/3}$

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N} = 2\left(\frac{g\pi}{6}\right)^{2/3}\frac{m}{\hbar^2}\theta\left(\frac{V}{N}\right)^{2/3}$$

$$C_V = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = k_B\left(\frac{g\pi}{6}\right)^{2/3}N\theta\left(\frac{V}{N}\right)^{2/3} = aT$$

20.04.2013г

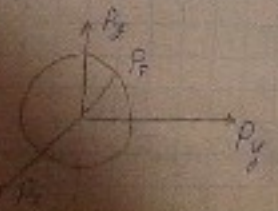
$$C_V = \left(\frac{g\pi}{6}\right)^{2/3}\frac{m}{\hbar^2}N\theta\left(\frac{V}{N}\right)^{2/3} = \beta N\theta\left(\frac{V}{N}\right)^{2/3} \sim T$$

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V; \quad E = \int_0^T C_V\,dT = \frac{3}{2}k_B T^2 N\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$$

II ч свойства ультрарел. газа ε:
рассм случай, когда μ уменьш

ж реальн частицы $\varepsilon = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} \sim p\cdot c$, если

$\varepsilon \gg mc^2$



if $T = 0$ фермі газ

$$p_F = (3\pi^2)^{1/3}\left(\frac{N}{V}\right)^{1/3}\hbar$$

$$\varepsilon_F = \mu(0) = c\,p_F = (3\pi^2)^{1/3}c\left(\frac{N}{V}\right)^{1/3}\hbar$$

$$dN_p = \frac{2\cdot 4\pi V p^2\,dp}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V p^2\,dp}{\pi^2\hbar^3}$$

$$E = V\int_0^{p_F}\frac{g\,c\,p^2\,dp}{\pi^2\hbar^3} = \frac{cV}{4\pi^2\hbar^3}p_F^4 = \frac{(3\pi^2)^{4/3}V}{4\pi^2\hbar^3}\left(\frac{N}{V}\right)^{4/3}\hbar^4$$

$$P = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_N = -\frac{(3\pi^2)^{4/3}N^{4/3}}{4\pi^2\,3V^{4/3}}\frac{V}{V} = \frac{1}{3}\frac{E}{V}$$

$$PV = \frac{1}{3}E$$

Для сверх. частиц $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$

ж. фонона $\hbar\omega = \hbar k c = p c$

Найдем вклад ф. волнового ч у нашем газе (берем со знаком „+" т.к. работаем с фермионами)

$$\Omega = -\frac{TVk_B}{\pi^2c^3\hbar^3}\int_0^T \varepsilon^2\ln\left(1+e^{\mu/\theta}\right)d\varepsilon \quad \text{// интегрируем по частям //} =$$

$$= -\frac{TVk_B}{\pi^2c^3\hbar^3}\left[\frac{\varepsilon^3}{3}\ln\left(1+e^{\mu/\theta}\right)\Big|_0^T + \frac{1}{3\theta}\int_0^T\frac{\varepsilon^3}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\theta}}+1}d\varepsilon\right] =$$

$$= -\frac{V}{3\pi^2c^3\hbar^3}\int_0^T\frac{\varepsilon^3}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\theta}}+1}d\varepsilon =$$

$$\left\| dN_\varepsilon = \frac{V\varepsilon^2\,d\varepsilon}{\pi^2\hbar^3c^3\left(e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\theta}}+1\right)} \right\| = -\frac{1}{3}E = -PV$$

Найдем адиабату Пуассона:

Введем переменные пределы-ю. $z = \frac{\varepsilon}{\theta}$

$$\Omega = -\frac{V\theta^4}{3\pi^2 c^3 \hbar^3}\int_0^\infty \frac{z^3 dz}{e^{z-\theta}+1} \sim \theta^4 \int_0^\infty \frac{z^3 dz}{e^{z-\theta}-1}$$

$S = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_\mu$ — одноф. ф. $3^{го}$ порядка

$N = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_T$ — одноф. ф. $3^{го}$ порядка

$\frac{S}{N} \sim \varphi\left(\frac{\mu}{\theta}\right)$ $\qquad S = const$, $\mu/\theta = const$

$$\frac{PV}{\theta^4} = const$$

$\frac{N}{V} \sim \theta^3 \to V \sim \frac{1}{\theta^3}$

$PV^{1/3} = const$

$VT^2 = const$ $\qquad \frac{T^4}{P} = const$

$\gamma = \frac{7}{3}$

Посчитаем адиабату не связан с энергетик-ю.

Газ Бозе-Эйнштейна

- if $T = 0 \Rightarrow \mu = 0$, $E = 0$
все частицы на $0^{вом}$ энергетич. уровне →
→ Бозе-конденсация

- if $T \neq 0$

$$\frac{N}{V} = \frac{g(m\theta)^{3/2}}{2^{3/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{\sqrt{z}\,dz}{e^{z-\frac{\mu}{\theta}}-1}$$

$\frac{N}{V} = const$

Для Бозе частиц: $\mu < 0$

или понижают T, то μ по величине будет, $\theta(\mu)$ убывать и при $\mu(T_c) = 0$ — начал то температуру T_c ошибкой найдем

$$\frac{N}{V} = \frac{g(m k_B T_c)^{3/2}}{2^{3/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{\sqrt{z}\,dz}{e^z-1} \leftarrow$$

$$\int_0^\infty \frac{z^{x-1}}{e^z-1}dz = \Gamma(x)\zeta(x) \to \int_0^\infty \frac{\sqrt{z}\,dz}{e^z-1} = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\zeta\left(\frac{3}{2}\right)$$

$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$

$\zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 2{,}612$

$$T_c = \left(\frac{2^{3/2}\pi^2\hbar^3(N/V)}{g(mk_B)^{3/2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}\right)^{2/3} \sim$$

$$\sim \frac{3{,}31}{g^{2/3}}\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$$

$$N = \sum_k \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_k-\mu}{\theta}}-1} \Rightarrow \frac{N}{V} = \frac{g\,m^{3/2}}{2^{3/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon}\,d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\theta}}-1} \leftarrow$$

← если так, что „первый" слагаем $\varepsilon_k = 0$ — нет частиц на $0^{вом}$ же уровне

$$N_{\varepsilon>0} = \frac{Vg(m\theta)^{3/2}}{2^{3/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{\sqrt{z}\,dz}{e^z-1} = N\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$$ — число нормальных частиц

$$N_{\varepsilon=0} = N - N_{\varepsilon>0} = N\left[1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}\right]$$ — число конденсат. частиц

Найдем энергию системы частиц

$$E = \frac{Vg(m\theta)^{3/2}\theta}{2^{3/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{z^{3/2}dz}{e^{z-1}} = \frac{Vg(m\theta)^{3/2}\theta}{2^{3/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{z^{5/2}dz}{e^z-1} =$$

$$= \left\|\int \frac{z^{x-1}dz}{e^z-1} = \Gamma\left(\frac{5}{2}\right)\zeta\left(\frac{5}{2}\right),\ \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}\right\| \Rightarrow$$

$$E = 0{,}77\,N_{k_B}\,T\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$$

$$E = 0{,}128\,g\,\frac{m^{3/2}T^{5/2}}{\hbar^3}V$$

$$= \iint_{\Omega_0} \left| \frac{\partial(q, p)}{\partial(p_0, q_0)} \right| dp_0\, dq_0$$

Нужно показ, что якобиан не зависит от времени → и равен 1

Введем обозначения: вектор $X = (x_1, \dots, x_{2n})$

$x_i = q_i$

$x_{n+i} = p_i$

$$D(t) = \frac{\partial(q, p)}{\partial(q_0, p_0)} \quad ; \quad a_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial x_j}$$

что значит якобиан от времени не зависит? →

$$-\frac{d}{dt} D(t) = \sum_{i,j} \frac{\partial D}{\partial a_{ij}} \frac{da_{ij}}{dt} = \sum_{i,j} A_{ij} \frac{da_{ij}}{dt}$$ скорости

$$\frac{da_{ij}}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial x_i}{\partial x_j} = \frac{\partial^2 x_i}{\partial t\, \partial x_j} = \frac{\partial^2 x_i}{\partial x_j\, \partial t} = \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_j} \quad (=)$$

меняем смысл м/у корнем ⇒

$$(=) \sum_{s=1}^{2n} \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_s} \frac{\partial x_s}{\partial x_j} = \sum_{s=1}^{2n} \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_s} a_{sj}$$

$$\frac{d}{dt} D = \sum_{i,j,s} A_{ij} \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_s} a_{sj} = \sum_{i,s} \left(\sum_j A_{ij} a_{sj} \right) \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_s} =$$

$$= \sum_{i,s} \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_s} D \delta_{is} = \left\| \begin{matrix} i = s \to D \\ i \neq s \Rightarrow 0 \end{matrix} \right\| = D \sum_i \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_i} = D \operatorname{div} \dot{X}$$

от конкретного вида сист

условие несжимаемости жидкости: $\operatorname{div} \vec{v} = 0$

$$\dot{X} = (\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n, \dot{p}_1, \dots, \dot{p}_n)$$

$$\operatorname{div} \dot{X} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right) = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i} \right) = 0$$

смешан. произв. не зависит от порядка дифф-я

покажем, что от времени не зависит, а это значит: $D(0) = D(t) = \frac{\partial(q_0, p_0)}{\partial(q_0, p_0)} = 1$

$$\frac{\partial x_i}{\partial x_j} = \delta_{ij}$$

Докажем, что объем в нач. времени не изменяется. (формула сложн.)

Вспомним! (из теории вероятности)

Если у нас имеется некот. случ. величина, которая принимает дискр. набор значений

$x \to \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$

$\omega(x_i) > 0 \quad \sum_{i=1}^{n} \omega(x_i) = 1$ – формальное определение вероятности

Возьмем некоторые комбинационные

$X' = \{x_{j_1}, \dots, x_{j_s}\} \quad s < n$

$$\omega(X') = \sum_{p=1}^{s} \omega(x_{j_p})$$

Возьмем другую комб-ю $X'' = \{x_1, \dots, x_m\}$, $m < n$

причем эти две комб не пересек-ся: $X' \cap X'' = \emptyset$

$$\omega(X' + X'') = \omega(X') + \omega(X'')$$

x, y – случ. величины ⇒ $\omega(x_i, y_j) > 0$

$$\sum_{i,j} \omega(x_i, y_j) = 1$$

$X' = \{x_{i_1}, y_{j_1}\} \quad l < n$

$m < c$

$$\omega(X') = \sum_{t=1}^{l} \sum_{p=1}^{m} \omega(x_t, y_p)$$

$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = \frac{5}{2}\frac{E}{T}$

$\frac{1}{T}C_V = dS \Rightarrow S = \int \frac{C_V}{T} dT = \frac{5}{3}\frac{E}{T} \Rightarrow$

$\Rightarrow$ для ж. $F = E - TS = -\frac{2}{3}E$

$F = G - PV = \mu N + \Omega$, но у нас $\mu = 0$

$F = \Omega \Rightarrow \Omega = -\frac{2}{3}E$

$P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = \frac{2}{3} \cdot 0.121\, g \frac{кг^{3/2}\, T^{5/2}}{\hbar^3}$

P не зависит от $V \Rightarrow P \neq P(V)$

$\boxed{P \sim T^{5/2}}$

при $T < T_0 \Rightarrow$ все ч. оказываются конденсат.

11.02
2012г

$G = G' + G''$ $\quad G' \cap G'' = \varnothing$

Th о сложении вероятностей

$$\omega(G' + G'') = \omega(G') + \omega(G'')$$

Всегда вер-ст величины x

$$\omega_1(x_i) = \sum_{j=1}^{m} \omega(x_i, y_j)$$

$$\omega_2(y_j) = \sum_{i=1}^{n} \omega(x_i, y_j)$$

Можем ввести понятие условной вер-ти

$$\omega_{x_i}(y_j) = \frac{\omega(x_i, y_j)}{\omega_1(x_i)}$$

$$\omega_{y_j}(x_i) = \frac{\omega(x_i, y_j)}{\omega_2(y_j)}$$

Мы считаем x и y статистически независимыми, если $\omega(x, y) = \omega(x)\,\omega(y)$

Это можно применить и к независимому (балтному) кол-ву величин.

Вероятностное понятие вер-ти

$\omega(x) > 0 \qquad x \in [x_1, x_2]$ непрер. интервал

вер-ть того, что в инт-ле $x, x + dx \Rightarrow \int_{x_1}^{x_2} \omega(x)\,dx = 1$

Если знаем случ. величину x, всегда можем найти ср. значение:

$$\bar{F} = \int_{x_1}^{x_2} F(x)\,\omega(x)\,dx$$

$$\bar{F} = \sum_{i=1}^{n} F(x_i)\,\omega(x_i)$$

I Проблема формулировки как вер-ть нужно каждому ему приписать, чтобы мы считали под вероятностью

II Определение частоты каких событий в последовательности серии испытаний → величина при одних и тех же условиях → новые благоприятных величин и делим их на общее кол-во

Вер-ть по Мизесу:

Мы провели много из n-испытаний → $n(x)$

$$\omega(x) = \lim_{n \to \infty} \frac{n(x)}{n}$$

(n(x) — благоприятное число раз; n — общее число испытаний)

из последов-ти n выделим подпоследов-ть n'

$n' \subset n, \quad n'(x) \subset n(x)$

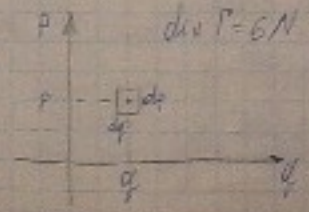
Если при таком выборе подпосл-ти n' будет справедливо $\frac{\omega'(x_1)}{\omega'(x_2)} = \frac{\omega(x_1)}{\omega(x_2)}$

$$\omega'(x) = \lim_{n \to \infty} \frac{n'(x)}{n'}$$

Мы хотим найти уравнения вр-ти последующей системы в обобщенных типах

$$\{q, p\} \longrightarrow \{a_1, \ldots, a_s, T\}$$

$\operatorname{div} \Gamma = 6N$



В каждом из измерений пишем свое

$dn = \rho(p,q,t)\, dp\, dq$

$n = \int \rho(p,q,t)\, dp\, dq$

$\omega(p,q,t)\, dp\, dq = \frac{dn}{n} = \frac{\rho(p,q,t)}{n}\, dp\, dq$

$\omega(q,p,t) = \frac{\rho(q,p,t)}{n}$

$\int \omega(q,p,t)\, dp\, dq = 1$

$\overline{G(q,p)} = \int G(p,q)\, \omega(p,q,t)\, dp\, dq$

Как найти ф. распределения?

получим ур. Лиувилля.

Фазовые точки движ. по своей траектории, в среднем по ансамблю будут распределены с пл. ф. и ф-ии. $\omega(x,t)\, d\sigma$

$x_1 = q_1$ (импульс) ; $x_{3n} = p_n$

$\omega(X,t)\, dX = \omega(X', t+dt)\, dX'$, $dX = dq\, dp$

по теореме Лиувилля: $dX = dX'$
$dp\, dq = dp'\, dq'$

$\omega(X,t) = \omega(X', t+dt)$

$q_i = q_i + \dot{q}_i\, dt$; $p_i = p_i + \dot{p}_i\, dt$

$\omega(q,p,t) = \omega(q + \dot{q}\, dt, p + \dot{p}\, dt, t + dt)$

разл. в ряд по малым dt

$$\frac{d\omega(q,p)}{dt} = \frac{\partial \omega}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial \omega}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \omega}{\partial p_i} \dot{p}_i \right)$$

Скобка Пуассона =>

$$\Rightarrow \frac{\partial \omega}{\partial t} + \underbrace{\sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial \omega}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \omega}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right)}_{= -[H, \omega]} = 0$$

$\boxed{\frac{\partial \omega}{\partial t} = [H, \omega]}$ — ур. Лиувилля (как изм-ся ф-ия ф-ии со временем)

Т.д. равновесия — состояние в котором находится система и ее конечное состояние всегда не меняется

$\overline{G_{\text{стат}}} = \overline{G(p,q)} = \int G(p,q)\, \omega(p,q)\, dp\, dq$

нас интересуют стат. реш. ур. и (нет зав-ти от времени) : $\frac{\partial \omega}{\partial t} = 0$ Нужно найти такие решения, чтобы $[H, \omega] = 0$

$$\sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial \omega}{\partial p_i} - \frac{\partial \omega}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = 0$$

$$6N-1 \begin{cases} \frac{dq_1}{dp_1} = -\frac{\partial H / \partial p_1}{\partial H / \partial q_1}, \quad \frac{dq_{3n}}{dp_1} = \frac{-\partial H / \partial p_{3n}}{\partial H / \partial q_1} \\ \frac{dp_1}{dp_1} = \frac{\partial H / \partial q_1}{\partial H / \partial q_1}, \quad \frac{dp_{3n}}{dp_1} = \frac{\partial H / \partial q_{3n}}{\partial H / \partial q_1} \end{cases}$$

реш. этих сист. определяются интегр. движ., их $(6N-1)$, а он мог задать общее решение

$\omega(q,p) = F(\Phi_1, \dots, \Phi_{3n}, \Psi_1, \dots, \Psi_{3n})$

ф. распределения — инт. движ. (аддитивны)

- энергия $\Phi_1 = H(p,q)$
- импульс (3 комп. пр.) $\vec{P}$
- мом. импульса (3 комп. пр.) $\vec{M}$

} 7 инт. движ-я

Мы считали, что сист. не движ-ся и не вращ.
→ остается только 1 инт. движ. → ЭНЕРГИЯ

$\omega(q,p) = \omega(H(q,p))$

Эргодическая гипотеза

при столкн. сч-в у большущ. подгонят сист. ~~гамильтонаном~~ сохраняющ. интегралы

Вместо ее используем Больцман
- ~~сферы можно описать по всей поверхности равной энергии чуж. на~~
- P внутр. параметр, мы фиксируем внешн. поля и температуру

$$E_j = E_j(a_1, \dots, a_n, T)$$
$$E = F(a_1, \dots, a_n, T)$$

$T = f(a_1, \dots, a_n, E)$ → подставим → не внутр. поля, мы ф. внешн. поля и энергии

$$E_j = E_j(a_1, \dots, a_n; E)$$

! Нужно найти какой вид имеет пл. вер-ти, как функция гамильтониана.

Любая микросост. реализ-ся

30.01.2013 Сист. в кр. пример-й на внеш. средн. E-const, даже N, V – **микроканон. ансамбль Гиббса**

Пример сист. – осциллятор;
E, $E + \Delta E$ причем $\Delta E \ll E$

Предположим, что энергия лежит в инт. $[E, E+\Delta E]$ и что все микросост. состоящие имеют одинак. энергию

$$\omega_E(p,q) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega} \checkmark \text{const} & ; E, E+\Delta E \\ 0 & ; \text{вне инт. ме} \end{cases}$$

все вер-ти одинак.

Ω – определяет сколько вс.; число частиц входящих в анс. Гиббса.

Микроканон. анс. Гиббса интересен тем, что мы можем сразу применить теорему о равномерности вероятностей (периодич. решений совсем)

if $\Delta E \to 0$ (получим δ-ф-ию)

Энергия сист. – это гамильтониан

$$\boxed{\omega_E(p,q) = \frac{1}{\Omega}\delta(E - H(p,q))} \text{ – микроканон. распр. Гиббса}$$

Как найти Ω – ?

$$\int_{(\Gamma)} \omega_E(p,q)\, dp\, dq = 1$$

$$\Omega(E) = \int_\Gamma \delta(E - H(p,q))\, dp\, dq$$

кол-во микросост., которые имеют заданную нам энергию; кол-во состояний, входящих в ансамбль Гиббса, или имеют рав. знач. E

Внешн. поля-ра оказ. внешним влиянием. Мы можем найти средн. для ансамбля

$$\overline{G(p,q)} = \int_{(\Gamma)} G(p,q)\, \omega_E(p,q)\, dp\, dq =$$
$$= \frac{1}{\Omega}\int_{(\Gamma)} G(p,q)\, \delta(E - H(p,q,a))\, dp\, dq$$
$a = \{a_1, \dots, a_n\}$

Мы считали, что по вр-ни микросост. сист. фиксируются инт. движения – энергия – **эргодическая гипотеза**.

$$\omega(p,q) = F(H(p,q))$$

$E_j = E_j(a_1, \dots, a_n, E)$ – внутр. поля мы ф. внешн. поля и энергии

Теор. смеш w_E - ?

$$\Gamma(E) = \int_{E_0(a)}^{E} dE\, \Omega(E,a) = E_0 \text{ - ур основного пост. состояния (нет знат энергии)}$$

$$= \int_{E_0(a)}^{E} dE \int_{(\Gamma)} \delta(E - H(p,q,a))\, dp\, dq - \left\| \text{меняем порядок интегрир.} \right\| =$$

$$= \int_{(\Gamma)} dp\, dq \underbrace{\left(\int_{E_0(a)}^{E} \delta(E - H(p,q,a))\, dE \right)}_{=1} =$$

$$\left\| \begin{array}{l} \int_{x_1}^{x_2} \delta(x-a)\, dx = 1, \quad x_1 \le a \le x_2 \\ \int_{x_1}^{x_2} \delta(x-a) f(x)\, dx = f(a) \end{array} \right\|$$

$$= \int_{(H(p,q,a) \le E)} dp\, dq$$ ← мера в микроскоп. пов-ти

$\Gamma(E)$ - объем, ограниченный поверхностью, уравнение которой $\boxed{H(p,q,a) = E}$

$$\Omega(E,a) = \frac{\partial \Gamma(E,a)}{\partial E}$$

$\Omega(E,a)\,dE$ - объем, заключ. между двумя ур-ми гиперпов-ти, ур-е кот. образ-ся $\left.\begin{array}{l} H(p,q) = E \\ H(p,q) = E + dE \end{array}\right\}$ ур. изоэнерг. пов-ти

Как ввести Γ/Δ величины?

не сводится к механическим: интеграл и энергия

энтропия - мера информ. сист., опис. т.д. вели как целое.

Берем дифференциал от log этой величины

$$d \ln \Gamma(E,a) = \frac{1}{\Gamma}\left(\left(\frac{\partial \Gamma}{\partial a}\right)_E da + \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial E}\right)_a dE \right)$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial a} = \int_{E_0(a)}^{E} dE\, \frac{\partial \Omega(E,a)}{\partial a} - \Omega(E_0,a)\, \frac{\partial E_0(a)}{\partial a} =$$

$$= \int_{E_0(a)}^{E} dE\, \underbrace{\frac{\partial}{\partial a} \int_{(\Gamma)} \delta(E - H(p,q,a))\, dp\, dq}_{} - \frac{\partial E_0(a)}{\partial a} \int \delta(E_0 - H(p,q))\, dp\, dq =$$

$$= \int_{E_0(a)}^{E} dE \left(\int_{(\Gamma)} dp\, dq\, \frac{\partial}{\partial E} \delta(E - H(p,q,a)) \frac{\partial H(p,q,a)}{\partial a} \right) - \frac{\partial E_0(a)}{\partial a} \int \delta(E_0 - H(p,q))\, dp\, dq =$$

$$= -\int_{(\Gamma)} dp\, dq \left[\delta(E - H(p,q,a)) \frac{\partial H(p,q,a)}{\partial a} - \delta(E_0(a) - H(p,q,a)) \frac{\partial E_0(a)}{\partial a} \right] -$$ особен.

$$- \frac{\partial E_0(a)}{\partial a} \int_{(\Gamma)} \delta(E_0 - H(p,q,a))\, dp\, dq =$$

$$= -\int_{(\Gamma)} dp\, dq\, \frac{\partial H(p,q)}{\partial a}\, \delta[E - H(p,q,a)]\, \frac{\Omega(E,a)}{\Omega(E,a)} =$$

$$= -\Omega(E,a)\, \overline{\frac{\partial H(p,q,a)}{\partial a}}$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial a} = -\Omega(E,a)\, \overline{\frac{\partial H(p,q,a)}{\partial a}} = \Omega(E,a)\, \bar{A}$$

$$\bar{A} = -\overline{\left(\frac{\partial H}{\partial a}\right)}$$

↳ ф-ция, сопряж. к данным параметр-ру

$$d \ln \Gamma(E,a) = \frac{1}{\Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial E} (\bar{A}\, da + dE) = \frac{\partial \ln \Gamma}{\partial E} (\bar{A}\, da + dE)$$

$$dE = T\, dS - \bar{A}\, da$$

$$dS = \frac{1}{T} (\bar{A}\, da + dE), \quad \boxed{S = k_B \ln \Gamma(E,a)}$$

$$\boxed{\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_a}$$

Объем фазового пр-ва очень и зав. так сильно поверхности пр-ва, наш объем ограничивается ограничивается его пов-ти. $\ln \Gamma = 6N$, $N \sim 10^{23}$

$S = k_B \ln \Omega(E) \cdot \Delta\Gamma = k_B \ln \Omega(E) - k_B \ln \Delta\Gamma$

по Больцману. $S = k_B \ln \omega$

15.02.2013г

Микроканонич. распр. Гиббса

$$\omega_E = \frac{1}{\Omega(E,a)} \delta(E - H(p,q,a))$$

→ будем считать у нас энергию $= E$

Все сводится к вычислению $\Gamma(E,a)$ →

$$\Gamma(E,a) = \int\limits_{\{H(q,p,a)\le E\}} dp\, dq$$

Нужно показать $G_{мак} = \overline{\overline{G}} - \overline{G}$ (ф. не фазовая; ф. по анс. Гиббса)

$\overline{\overline{G}}$ Мы можем записать как ур. в Гамильтоновом виде ($6N-1$), а можем через мат. функции (p^0, q^0)

$$\begin{cases} q_k = q_k(t, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{2N}, \alpha_1, \dots, \alpha_{2N}) \\ p_k = p_k(t, \beta_1, \dots, \alpha_{2N}) \end{cases} \to$$ через нач. данные

$$q_k = \varphi_k(p^0, q^0, t)$$
$$p_k = \psi_k(p^0, q^0, t)$$

$$\overline{\overline{G}} = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \int_0^t G(p_k(\tau, \beta_1, \dots, \alpha_{2N}), q_k(\tau, \beta_1, \dots, \alpha_{2N}))\, d\tau = f_0(E)$$

и в анс. ансамбле будет одно по энергии

$$\overline{G} = \int\limits_{(\Gamma)} G^0(\varphi_k(p^0, q^0, t), \psi_k(p^0, q^0, t))\, \omega(p, q)\, dp\, dq$$

ф. по анс. Гиббса от времени не зависит ⇒

$$\overline{\overline{G}} - \overline{G} = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \int_0^t d\tau \left\{ \int\limits_{(\Gamma)} G(\varphi_k(p^0, q^0, \tau), \psi_k(p^0, q^0, \tau))\, \omega(p, q)\, dp\, dq \right\} =$$

переходим к новым $\{p, q\} \to \{p^0, q^0\}$ ⇒
→ якоб. Th Лиувилля $dp\, dq = dp^0 dq^0$
$H(p, q, a) = H(p^0, q^0, a)$ ⇒
$\omega_E = \frac{1}{\Omega(E,a)} \delta(E - H(p^0, q^0, a))$

$$= \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \int_0^t d\tau \left\{ \int\limits_{(\Gamma)} G(\varphi_k(p^0, q^0, \tau), \psi_k(p^0, q^0, \tau))\, \omega(p^0, q^0)\, dp\, dq \right\} =$$

// меняем порядок интегрирования //

$$= \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \int\limits_{(\Gamma)} \omega(p^0, q^0)\, dp\, dq \int_0^t d\tau\, G(\varphi_k(p^0, q^0, \tau), \psi_k(p^0, q^0, \tau)) =$$

$$= \int\limits_{(\Gamma)} \omega(p^0, q^0)\, dp\, dq\, \overline{G} = f_0(E) \int\limits_{(\Gamma)} \omega(p^0, q^0)\, dp\, dq = f_0(E) \cdot \overline{G}$$

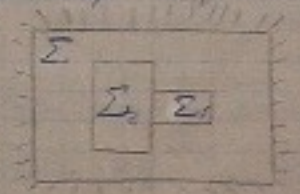
Применение метода не анс. Гиббса не приведет рез. ср. Гамильтона

Рассмотр. канонический ансамбль, метод распр. Гиббса

Канонич. - мног. во микросост., которые реализ. мак. состояние

Макросост. сист. N, T, V
Состояние сист-ы в контакте с термостатом

Нужно найти вер-ть распр. систем. Рассм. все системы, находящ. в ст. таким же, но бесконечно м/ф обоих



Σ_1 мал. по сравнению с Σ_0

$\Sigma = \Sigma_0 + \Sigma_1$

Σ_1: $\dim \Gamma_1 = 6N_1 = 2n$, $n = 3N_1$

$X = \{ q_1 = x_1, \ldots, p_n = x_{3N_1+n} \}$ $H_1(X)$ — гамильтониан на фаз. пр-ве Σ_1

Σ_2: $\dim \Gamma_2 = 6N_2 = 2m$, $m = 3N_2$

$Y = \{ y_1 = Q_1^{(2)}, \ldots, y_{3N_2} = P_1^{(2)} \}$ $H_2(Y)$

Σ: $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$

$N = N_1 + N_2$

$\dim \Gamma = 6N_1 + 6N_2 = 2(n+m)$

$$H(X,Y) = H_1(X) + H_2(Y) + H_{взаим}(X,Y)$$

$$\omega_E(X,Y) = \frac{1}{\Omega(E)} \delta(E - H(X,Y))$$

тогда Σ_1 можно рассматривать как термостат $N_2 \gg N_1 \gg 1$ — любая сис

$$\omega(X) = \int_{(Y)} \omega_E(X,Y)\, dY = \frac{1}{\Omega(E)} \int_{(Y)} \delta(E - H_1(X) - H_2(Y) - H_{взаим}(X,Y))\, dY$$

Предположения:

1. Считаем, что $H_{взаим}(X,Y) \ll H_1(X), H_2(Y)$ частицы лежат в среднем на расст. $r_0 \approx 10^{-7}$ см. $H_1 \sim r_0 V_1^{2/3}$ — объем взаимод. частиц. $/V_1 \Rightarrow$ $H_2 \sim r_0 V_2^{2/3}$ делим на V_2

$$\frac{r_0 V_1^{2/3}}{V_1} = \frac{r_0}{V_1^{1/3}} \ll 1, \quad \frac{r_0 V_2^{2/3}}{V_2} = \frac{r_0}{V_2^{1/3}} \ll 1$$

$H_{взаим}$ — нужно учитывать, чтобы уравнения не Φ работали

2. Покажем, что сист. макроскоп. будет стабильна

$$\lim_{N\to\infty} \frac{E}{N} = \frac{3}{2}\Theta$$

$$\lim_{N\to\infty} \frac{E}{N} = \lim_{N_1\to\infty} \frac{E}{N_1} = \frac{3}{2}\Theta$$

3. Покажем, что $H_2(X) \ll E$

Найдем плотность распр. энергии / плотность вероятн. для Гиббса

$$H_2(Y) = \underbrace{K^{(2)}(P^{(2)})}_{\text{кин. эн., зависит от всех импульсов}} + \underbrace{U^{(2)}(Q^{(2)})}_{\text{пот. энергия, зависит от всех коор}}$$

$$dY = dP^{(2)}\, dQ^{(2)}$$

$$\Omega_2(y) = \int_{\text{пространство}} \delta(y - K^{(2)}(P^{(2)}))\, dP^{(2)}$$

$$\omega(x) = \frac{1}{\Omega(E)} \int \delta(\underbrace{E - H_1(x) - U_2(Q^{(2)})}_{y} - K_2(P^{(2)}))\, dP^{(2)}\, dQ^{(2)}$$

$$\omega(x) = \frac{1}{\Omega(E)} \int \Omega_2(E - H_1(x) - U_2(Q^{(2)}))\, dQ^{(2)}$$

$$\Omega(E) = \frac{\partial \Gamma(E)}{\partial E} \quad \Rightarrow \quad \Omega_2(y) = \frac{\partial \Gamma_2(y)}{\partial y}$$

$$\Gamma(E) = \int_{(H(p,q)<E)} dp\, dq \qquad \Gamma_2(y) = \int_{\{K^{(2)}(P^{(2)})<y\}} dP^{(2)} = \int \Omega_2(y)\, dy$$

— поверхность постоянной энергии в фазовом

$$\Omega_2 = \int_{(P^{(2)})} \delta(y - K_2(P^{(2)}))\, dP^{(2)}$$

$$y = E - H_1(x) - U_2(Q^{(2)})$$

$$\int dy\, \Omega_2(y) = \Gamma_2(y) = \int dP^{(2)}; \quad K^2(P^{(2)}) = y$$

$$\Omega_2(y) = \partial \Gamma_2(y)/\partial y; \quad \{K^{(2)} \le y\}$$

$$K^2(P^{(2)}) = \sum_{n=1}^{3N_2} (P_n^{(2)})^2 / 2m_n = \sum_{n=1}^{3N_2} \Pi_n^2 = y$$

$$\Gamma_2(y) = a y^{3N_2/2}, \quad \Omega_2(y) = 3N_2/2\, a\, y^{3N_2/2 - 1}$$

27.01
10:32