

$$G_{\text{норм.}} = \overline{G(p, q)} = \int G(p, q) w(p, q) dp dq \quad \frac{\partial w}{\partial t} = 0$$

хотим найти стационарные реш. ур. Шрёдингера $\frac{\partial w}{\partial t} = 0$

$$[H, w] = 0$$

$$\sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial w}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial w}{\partial q_i} \right) = 0 \rightarrow \text{надо решить такую сист. ур-й в частных производных}$$

эквивалентная сист. в полных производных:

$$\begin{cases} \frac{dq_1}{dp_1} = - \frac{\frac{\partial H}{\partial p_1}}{\frac{\partial H}{\partial q_1}}, \dots, \frac{dq_{3N}}{dp_1} = \frac{\frac{\partial H}{\partial p_{3N}}}{\frac{\partial H}{\partial q_1}} \\ \frac{dp_2}{dp_1} = \frac{\frac{\partial H}{\partial q_2}}{\frac{\partial H}{\partial q_1}}, \dots, \frac{dp_{3N}}{dp_1} = \frac{\frac{\partial H}{\partial q_{3N}}}{\frac{\partial H}{\partial q_1}} \end{cases} \quad (6N-1) \quad w(q, p) = F(\varphi_1, \dots, \varphi_{3N}, \psi_1, \dots, \psi_{3N})$$

1 $\varphi_1 = H(p, q)$ if сист. эв. замкнутой (энергия-гамильтониан сист.)

+ 3 $\vec{p}$ - импульс

+ 3 $\vec{M}$ - мом. имп.

$$w(q, p) = w(H(q, p))$$

эргодическая гипотеза: при описании

всех 7 аддитивных $\int$ движения $\forall$ мех. сист. опред. роль играет энергия (из всех $\int$ движения)

траект. движ. мех. сист. лежит на изоэнергетической пов-ти

$$b_j = b_j(a_1, \dots, a_n, T) \quad \text{вн. пар-ры есть } \varphi \text{ и } \psi \text{ пар-ры и темп-ра}$$

$$\boxed{E = E(a_1, \dots, a_n, T)} \rightarrow T = f(a_1, \dots, a_n, E) \rightarrow \boxed{b_j = b'_j(a_1, \dots, a_n, E)}$$

температура пар-ры

внешн. пар-ры

все внутр. пар-ры есть φ и внешн. пар-ры и E .

20.02.13.

$$(E, E + \Delta E)$$

$$\Delta E \ll E$$

$$E = \text{const}, N, V$$

$$w_E(p, q) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega} & E, E + \Delta E \\ 0 & \text{вне интервала} \end{cases}$$

вер. того

что сист. в микроканонич. ансамбле Гиббса реализ. заданное макроскоп. состояние

микроканоническое распределение

микроканонич. ансам. Гиббса

$$\frac{1}{2} \quad \text{палочка (спин/решка)}$$

$$\frac{1}{6} \quad \text{кубик}$$

$$\vdots$$

$$\frac{1}{C} \quad , \quad C - \text{стат. вес}$$

$$\Omega = \underline{\underline{\Omega}} - \text{стат. вес}$$

число микросостояний, ком. имеют заданное значение энергии

$$\Delta E \rightarrow 0 \quad \text{плотн.-функция}$$

$$w_E(p, q) = \frac{1}{\Omega} \delta(E - H(p, q))$$

индекс E - означает микроканонич. состояние

это есть

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

микроканоническое распределение Гиббса

$$\Omega(E) = \int_{(\Gamma)} \delta(E - H(p, q)) dp dq$$

кол-во систем в микроканонич. состоянии выходя. в ансам. Гиббса

теорема об априорной тер.м. содвинутости

$$\overline{G(p, q)} = \int_{(\Gamma)} G(p, q) w_E(p, q) dp dq = \frac{1}{\Omega} \int_{(\Gamma)} G(p, q) \delta(E - H(p, q)) dp dq$$

среднее по микроканонич. ансам. Гиббса

$$w(p, q) = F(H(p, q))$$

$$b_j = b_j(a_1, \dots, a_n, E)$$

$$\int_{E_0(a)}^E dE \Omega(E, a) = \Gamma(E) = \int_{E_0(a)}^E dE \int_{(\Gamma)} \delta(E - H(p, q, a)) dp dq = \int_{(\Gamma)} dp dq \int_{E_0(a)}^E \delta(E - H(p, q, a)) dE$$

E_0 - мин. энерг. сост. системы (мин энерг., ком. могут иметь заданная система)

$$\int_{x_1}^{x_2} \delta(x - a) dx = 1, \quad \int_{x_1}^{x_2} \delta(x - a) f(x) dx = f(a) \quad x_1 \leq a \leq x_2$$

$$= \int dp dq = \Gamma(E) \rightarrow \text{объем фаз. пр-ва, соответ. изотермическому} \\ \text{проц., соответ. ур-е } H(p, q, a) = E.$$

$$H(p, q, a) = E$$

$$\Omega(E, a) = \frac{\partial \Gamma(E, a)}{\partial E}; \quad \underline{\Omega(E, a) \cdot dE} - \text{объем, заключенный} \\ \text{между двумя пов-ми} \\ \text{соседней энергии:}$$

$$H(p, q) = E$$

$$H(p, q) = E + dE$$

$$d \ln \Gamma(E, a) = \left\{ \begin{array}{l} \text{расширение} \\ \text{пространства} \\ \text{выраж. отн. к числу пар-р} \end{array} \right\} = \frac{1}{\Gamma} \left(\left(\frac{\partial \Gamma}{\partial a} \right)_E da + \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial E} \right)_a dE \right)$$

$$E = \text{const}, N, V - \text{огранич. числ. пар-р}$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial a} = \int_{E_0(a)}^E dE \frac{\partial \Omega(E, a)}{\partial a} - \text{знач. соответ. ф. на гранич. пределе}$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial a} = \int_{E_0(a)}^E dE \frac{\partial \Omega(E, a)}{\partial a} - \Omega(E_0, a) \cdot \frac{\partial E_0(a)}{\partial a} \quad \text{⊖}$$

производная от гранич. предела

$$\left\{ \begin{array}{l} \Gamma(E) = \int_{E_0(a)}^E dE \Omega(E, a) = \int_{E_0(a)}^E dE \int_{\Gamma} \delta(E - H(p, q, a)) dp dq \\ \text{число пределов соответ. зад-ю от пар-р} \end{array} \right\}$$

$$\text{⊖} \int_{E_0(a)}^E dE \frac{\partial}{\partial a} \int_{\Gamma} \delta(E - H(p, q, a)) dp dq - \frac{\partial E_0(a)}{\partial a} \int_{\Gamma} \delta(E_0 - H(p, q, a)) dp dq =$$

$$= - \int_{E_0(a)}^E dE \int_{\Gamma} dp dq \frac{\partial}{\partial E} \delta(E - H(p, q, a)) \frac{\partial H(p, q, a)}{\partial a} - \frac{\partial E_0(a)}{\partial a} \int_{\Gamma} \delta(E_0 - H(p, q, a)) dp dq =$$

$$= \left\{ \int_a^b df(x) = f(b) - f(a) \right\} = - \int_{\Gamma} dp dq \left(\delta(E - H(p, q, a)) \frac{\partial H(p, q, a)}{\partial a} - \delta(E_0 - H(p, q, a)) \frac{\partial E_0(a)}{\partial a} \right)$$

$$- \frac{\partial E_0(a)}{\partial a} \int_{\Gamma} \delta(E_0 - H(p, q, a)) dp dq = \int_{\Gamma} dp dq \frac{\partial H(p, q, a)}{\partial a} \delta(E - H(p, q, a)) \stackrel{\text{здесь } H \rightarrow E_0}{=} \frac{\Omega(a)}{\Omega(a)} =$$

$$= -\Omega(a) \frac{\partial H(p, q, a)}{\partial a};$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial a} = -\Omega(E, a) \frac{\partial H(p, q, a)}{\partial a} = \Omega(E, a) \cdot \bar{A}$$

соответ. к числу пар-р сила

$$\bar{A} = - \left(\frac{\partial H}{\partial a} \right) \quad \text{покажем, что производная, что сопр. к внешн. пар-ру сдв}$$

$$d \ln \Gamma(E, a) = \frac{1}{\Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial E} (\bar{A} da + dE) = \frac{\partial \ln \Gamma}{\partial E} (\bar{A} da + dE) \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{это можно из: } d \ln \Gamma(E, a) = \frac{1}{\Gamma} \left(\left(\frac{\partial \Gamma}{\partial a} \right)_E da + \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial E} \right)_a dE \right) \\ \frac{\partial \Gamma}{\partial a} = - \Omega(E, a) \cdot \frac{\partial (H(p, q, a))}{\partial a} = \Omega(E, a) \cdot \bar{A} = \frac{\partial \Gamma}{\partial E} \cdot \bar{A} \end{array} \right\}$$

$$\Rightarrow dE = T dS - \bar{A} da \quad S = k_B \ln \Gamma(E, a) \quad \boxed{\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_a}$$

$$dS = \frac{1}{T} (\bar{A} da + dE)$$

$$\dim \Gamma = 6N$$

25.02.13.

* найдем энр. $\bar{A}$!

$$E, N, V \quad E, E + dE \quad w_E = \frac{1}{\Omega(E, a)} \delta(E - H(p, q, a))$$

$\Gamma(E, a)$ - объем, кот. занимает пов-ть пост. энергии в фаз. пр-бе

$$S = k_B \ln \Gamma(E, a)$$

$$H(p, q, a) = E \quad H(p, q, a) = E + dE \quad \Omega(E, a) dE$$

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_a \quad \bar{A} = \frac{\partial \Gamma(E, a)}{\partial a} \frac{1}{\Omega}; \quad \int_{\Gamma} G(p, q) w_E(p, q, a) dp dq = \bar{G}$$

$$\Gamma(E, a) = \int_{\{H(p, q, a) \leq E\}} dp dq$$

$$G_{\text{набл.}} = \tilde{G} = \bar{G}$$

показываем, что ср. по бор. совпадает с ср. по ант. Тудаса

$$G_{\text{набл.}} = \tilde{G} = \overline{G}$$

$(6N-1)$ интеграл функции или через нач. условия (p^0, q^0)

$$\begin{cases} q_k = q_k(t + \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{3N}, \alpha_1, \dots, \alpha_{3N}) \\ p_k = p_k(t + \beta_1, \dots, \alpha_{3N}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} q_k = \psi_k(p^0, q^0, t) \\ p_k = \chi_k(p^0, q^0, t) \end{cases}$$

$$\tilde{G} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t G(p_k(\tau + \beta_1, \dots, \alpha_{3N}) q_k(\tau + \beta_1, \dots, \alpha_{3N})) d\tau = f_G(E)$$

Эргодическая гипотеза

$$b_j = b_j\{a_1, \dots, a_n, E\}$$

$$\overline{G} = \int_{(\Gamma)} G^*(\psi_k(p^0, q^0, t), \chi_k(p^0, q^0, t)) w(p, q) dp dq$$

состояние максим.
переход

$$\boxed{\overline{G}} = \tilde{G} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t d\tau \left(\int_{(\Gamma)} G(\psi_k(p^0, q^0, \tau), \chi_k(p^0, q^0, \tau)) w(p, q) dp dq \right) = \left\{ \begin{matrix} \{p, q\} \rightarrow \\ \{p^0, q^0\} \end{matrix} \right\} =$$

$$= \left\{ \begin{matrix} H(p, q, a) = H(p^0, q^0, a) \\ W_E = \frac{1}{\Omega(E, a)} \delta(E - H(p^0, q^0, a)) \end{matrix} \right\} =$$

$$\begin{matrix} dp dq = dp^0 dq^0 \\ \text{по Th. Лангмюра} \end{matrix}$$

$$= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t d\tau \left(\int_{(\Gamma)} G(\psi_k(p^0, q^0, \tau), \chi_k(p^0, q^0, \tau)) w(p^0, q^0) dp^0 dq^0 \right) =$$

$$= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_{(\Gamma)} w(p^0, q^0) dp^0 dq^0 \int_0^t d\tau G(\psi_k(p^0, q^0, \tau), \chi_k(p^0, q^0, \tau)) =$$

$$= \int_{(\Gamma)} w(p^0, q^0) dp^0 dq^0 \tilde{G} = f_G(E) \int_{(\Gamma)} w(p^0, q^0) dp^0 dq^0 = f_G(E) = \boxed{\tilde{G}}$$

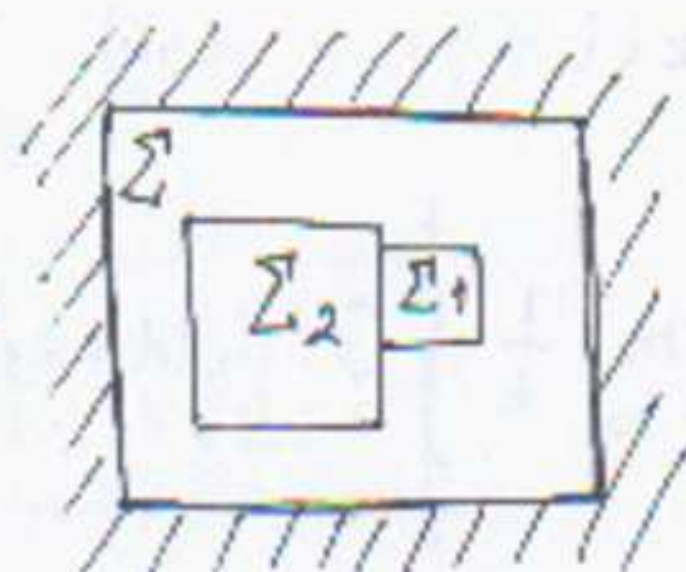
$$W_E = \frac{1}{\Omega(E, a)} \cdot \delta(E - H(p^0, q^0, t))$$

получение микроканон. распределения Гиббса

E, N, V

сист.: термостат T, N, V задаем макроскоп. состояние
температура T число частиц N объем V

Пусть у нас имеется две системы: $\rightarrow$
система Σ - изолирована, она состоит
из двух подсистем Σ_1 и Σ_2 ;



замкнутая

$$\Sigma = \Sigma_1 + \Sigma_2; \Sigma_1 \dim \Gamma_1 = 6N_1 \quad X = \{q_k = x_k, p_k = x_{3N+k}\}, H_1(X)$$

$$\Sigma_2 \dim \Gamma_2 = 6N_2 \quad Y = \{y_j = Q_j^{(2)}, y_{3N_2+j} = P_j^{(2)}\}, H_2(Y)$$

2n, n = 3N₁ 2m, m = 3N₂

$$\Sigma \quad N = N_1 + N_2 \quad \dim \Gamma = 6N_1 + 6N_2 = 2(n+m)$$

$$\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2 \quad \underline{X+Y}, \quad \text{гамильтониан объединенной системы:}$$

$$H(X, Y) = H_1(X) + H_2(Y) + H_{\text{вз.}}(X, Y)$$

Σ - замкнутая система; она описывается микроканон. ансамблем
плотн. вероятности $W_E(X, Y) = \frac{1}{\Omega(E)} \delta(E - H(X, Y))$ где суммируем по всем

$N_2 \gg N_1 \gg 1$ чтобы система Σ_2 играла роль термостата

$$W(X) = \int_{(Y)} W_E(X, Y) dY = \frac{1}{\Omega(E)} \int_{(Y)} \delta(E - H_1(X) - H_2(Y) - H_{\text{вз.}}(X, Y))$$

предположение:

① $H_{\text{вз.}}(X, Y) \ll H_1(X), H_2(Y)$, $r_0 \approx 10^{-8}$ см точки свои взаимодействия
частицы

объем в кон. будет произв. взаимод. с

$$\frac{r_0 \cdot V_1^{2/3}}{V_1}; \frac{r_0 \cdot V_2^{2/3}}{V_2} \Rightarrow \frac{r_0}{V_1^{1/3}} \ll 1 \quad \frac{r_0}{V_2^{1/3}} \ll 1$$

$$\textcircled{2} \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{E}{N} = \frac{3}{2} \Theta \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{E}{N} = \lim_{N_2 \rightarrow \infty} \frac{E}{N_2} = \frac{3}{2} \Theta \quad (N_2 \gg N_1 \gg 1)$$

$$\textcircled{3} \quad H_1(x) \ll E \quad \text{Энергия первой подсистемы} \ll \text{энергия всей сист.}$$

$$H_2(y) = \underbrace{K^{(2)}(p^{(2)})}_{\text{кин. эн.}} + \underbrace{U^{(2)}(Q^{(2)})}_{\text{потенциал, эн.}} \quad dy = dp^{(2)} dQ^{(2)}$$

$$\Omega_K(y) = \int_{(p^{(2)})} \delta(y - K_2(p^{(2)})) dp^{(2)}$$

$$W(x) = \frac{1}{\Omega(E)} \int \delta(E - \underbrace{H_1(x) + U_2(Q^{(2)})}_y - K_2(p^{(2)})) \cdot dp^{(2)} dQ^{(2)}$$

$$W(x) = \frac{1}{\Omega(E)} \int \Omega_K(E - H_1(x) - U_2(Q^{(2)})) dQ^{(2)}$$

$$\Omega(E) = \frac{\partial \Gamma(E)}{\partial E}$$

$$\Gamma(E) = \int_{\{H(q,p) \leq E\}} dp dq$$

$$\Omega_K(y) = \frac{\partial \Gamma_K(y)}{\partial y}$$

$$\Gamma_K(y) = \int_{K^{(2)}(p^{(2)}) \leq y} dp^{(2)} = \int \Omega_K(y) dy$$

27.02.13

$$\int dy \Omega_K(y) = \Gamma_K(y) \Big|_{y=E} = \left\{ y = E - H_1(x) - U_2(Q^{(2)}) \right\}$$

$$K^{(2)}(p^{(2)}) = y$$

$$\textcircled{=} \int_{\{K^{(2)} \leq y\}} dp^{(2)}$$

$$\Omega_K(y) = \frac{\partial \Gamma_K(y)}{\partial y}$$

$$K^{(2)}(p^{(2)}) = \sum_{n=1}^{3N_2} \frac{(\vec{p}_n^{(2)})^2}{2m_n} = \sum_{k=1}^{3N_2} p_k^2 = y$$

$$p_k = \frac{p_k}{\sqrt{2m_n}}$$

$$k = 3(n-1) + \alpha$$

$$\alpha = 1, 2, 3, \dots$$

$$\sqrt{y} = R \quad \text{радиус сферы}$$

$$\Gamma_K(y) = a y^{\frac{3N_2}{2}}$$

$$\Omega_K(y) = a \frac{3N_2}{2} y^{\frac{3N_2}{2} - 1}$$

$$W(E) = \int \Omega_K(y) dy$$

$$w(E) = \int \Omega_k(y) dQ^{(2)} = \frac{1}{\Omega(E)} \int \Omega_k(E - H_1(x) - U_2(Q^{(2)})) dQ^{(2)}, \quad N_2 \gg 1$$

$$\Omega_k(y) = \frac{3N_2}{2} \cdot a \frac{1}{\Omega(E)} \int (E - H_1(x) - U_2(Q^{(2)}))^{\frac{3N_2}{2} - 1} dQ^{(2)} = \frac{3N_2}{2} \cdot a \frac{1}{\Omega(E)} (E - H_1(x))^{\frac{3N_2}{2}}$$

$$\int \left(1 - \frac{U_2(Q^{(2)})}{E - H_1(x)}\right)^{\frac{3N_2}{2}} dQ^{(2)} = \left(\frac{Ma}{\Omega(E)} E^M\right) \left(1 - \frac{H_1(x)}{E}\right)^M \int \left(1 - \frac{U_2(Q^{(2)})}{E - H_1(x)}\right)^M dQ^{(2)} =$$

$$2) \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{E}{N} = \lim_{N_2 \rightarrow \infty} \frac{E}{N_2} = \frac{3}{2} \Theta \quad N_2 \gg N_1 \gg 1 \quad M = \frac{3}{2} N_2 \approx \frac{E}{\Theta}, \quad \boxed{E = M \cdot \Theta}$$

$$= \{E = M \cdot \Theta\} = b(E, M) \left(1 - \frac{H_1(x)}{M \cdot \Theta}\right)^M \int \left(1 - \frac{U_2(Q^{(2)})}{E - H_1(x)}\right)^M dQ^{(2)} \quad \ominus$$

$$3) H_1(x) \ll E$$

?

$$b(E, M) = b(E, M) \int \left(1 - \frac{U_2(Q^{(2)})}{M \cdot \Theta}\right)^M dQ^{(2)}$$

$$\ominus b(E, M) \left(1 - \frac{H_1(x)}{M \cdot \Theta}\right)^M = \mathfrak{Q}(\Theta) e^{-\frac{H_1(x)}{\Theta}}; \quad w(x) = \mathfrak{Q}(\Theta) e^{-\frac{H_1(x)}{\Theta}}$$

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

$$\mathfrak{Q}(\Theta) = e^{\frac{F(\Theta, a)}{\Theta}}$$

каноническое распредел. Тюдса

$$\int_{(r)} w(x) dx = 1 \quad e^{\frac{F(\Theta, a)}{\Theta}} \int e^{-\frac{H(x, a)}{\Theta}} dx = 1,$$

$$Z(\Theta, a) = \int_{(r)} e^{-\frac{H(x, a)}{\Theta}} dx$$

свободная энергия

$$\boxed{F = -\Theta \ln Z(\Theta, a)}$$

$F(\Theta, a)$ - своб. энергия Те равна
 Θ - свб. темп-ра к энтропии, ег.

$$dF = -SdT - \bar{A}da$$

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_a \quad \bar{A} = -\left(\frac{\partial F}{\partial a}\right)_T$$

$$G_{\text{нодл.}} = \int_{(r)} G(p, q) e^{\frac{F - H(p, q)}{\Theta}} dp dq$$

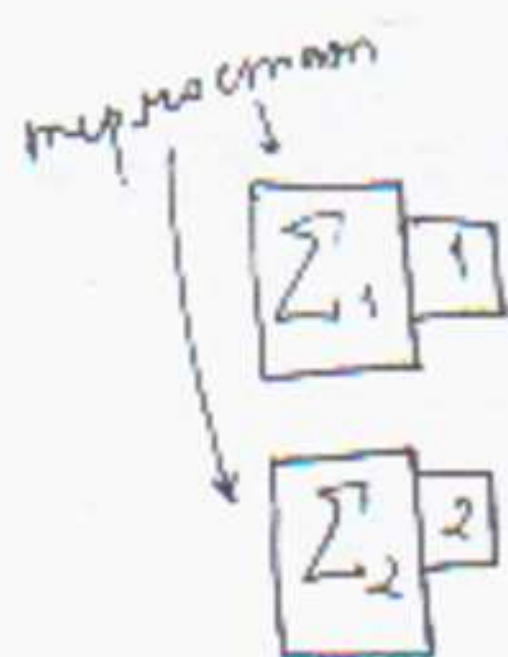
① θ - два. ф.-сист. системы и скал.-м сист. TDP

$\theta_1 = \theta_2$ сист. не болев. энерг. при мен. контакте

② $dS = \frac{\delta Q}{T}$

$\frac{1}{T}$ - два. интер. множитель

$dS = \frac{dU - \delta W}{T}$



$$\left. \begin{aligned} w_1(x_1) &= e^{\frac{F_1(\theta_1, a) - H_1(x_1, a)}{\theta_1}} \\ w_2(x_2) &= e^{\frac{F_2(\theta_2, a) - H_2(x_2, a)}{\theta_2}} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} w_1(x_1) \cdot w_2(x_2) &= e^{\frac{F_1}{\theta_1} + \frac{F_2}{\theta_2}} \cdot e^{-\frac{H_1(x_1)}{\theta_1} - \frac{H_2(x_2)}{\theta_2}} \end{aligned}$$



приводим к мен. контакту:

$$w(x_1, x_2) = e^{\frac{F_1}{\theta_1} + \frac{F_2}{\theta_2}} e^{-\frac{H_1(x_1)}{\theta_1} - \frac{H_2(x_2)}{\theta_2}} = \tilde{H}_2(x(x_1, x_2)) \left(\frac{1}{\theta_2} - \frac{1}{\theta_1} \right)$$

$\frac{1}{\theta_1} = \frac{1}{\theta_2} \Rightarrow$ никак. взаимог-я углов не будет

$$dS = \frac{\delta Q}{T} = \frac{dU - \delta W}{T} = \frac{dU + A da}{T}$$

условие нормировки:

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

② $\frac{\partial}{\partial \theta} \Big| \frac{\partial}{\partial a} :$ $\frac{1}{\theta} \int_{(\Gamma)} e^{\frac{F(\theta, a) - H(x, a)}{\theta}} \left(\frac{\partial F(\theta, a)}{\partial a} - \frac{\partial H(x, a)}{\partial a} \right) dx = 0$

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

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

$$\bar{A} = - \int \frac{\partial H}{\partial a} \cdot e^{\frac{F-H}{\theta}} dx$$

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

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

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

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

$$\boxed{\bar{H} = F - \frac{\partial F}{\partial \theta} \cdot \theta} \quad \text{уравнение Тейлора - Теллгольца} \Rightarrow F - \text{свободная энергия}$$

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

$$\bar{H} = U = F - \frac{\partial F}{\partial T} \cdot T \quad \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right) = -S$$

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

04.03.13.

$$w(x) = e^{\frac{F(\theta, a) - H(x, a)}{\theta}} \quad - \text{микроканоническое распределение Тейлора}$$

$$\frac{1}{\theta} (dU + \bar{A} da) = \frac{dS}{k_B}, \quad \frac{\partial}{\partial a} \left| \frac{\partial}{\partial \theta} \right| \int e^{\frac{F(\theta, a) - H(x, a)}{\theta}} dx = 1$$

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

$$\boxed{-\frac{\partial F}{\partial \theta} = \frac{\bar{H} - F}{\theta}} = \frac{1}{\theta} d\bar{H} - \frac{1}{\theta} [\bar{H} - F] d\theta + \frac{1}{\theta} (\bar{H} - F) d\theta + \frac{1}{\theta} \bar{A} da =$$

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

$$-\frac{\partial F}{\partial \theta} = \frac{S}{k_B}, \quad \boxed{\theta = k_B \cdot T} \quad \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_a = S$$

$$\boxed{\bar{H} = F - T \cdot \frac{\partial F}{\partial T} = U} \quad \text{уравнение Тейлора - Теллгольца}$$

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

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

Статистическая физика

Кодунов Валерий Дмитриевич

1 часть: Классич. стат. теория

2 часть: Квантов. стат. теория

- Литература:
1. Ландау "Стат. механика"
 2. Климантович "Стат. физика"
 3. Перликин "Стат. физ."
 4. Ландау, Лифшиц, т. 1.
 5. Звасников "Период. и стат. физ."
 6. Рунер, Ривкин
 7. Леонтович "Период. и стат. физ."

макроскоп. метод и микроскоп. метод

Э конечное число макроскоп. период-2 пар-б, кот. хар-т ТДС, как целое.
Мы выбираем внешние пар-ры. Их конечное число.

$$a_1, \dots, a_s \quad \frac{S+1}{S+2 \text{ пар-ра}} \quad N = \text{const} \quad (\text{число частиц фиксировано})$$

 $N \sim 10^{23}$. Исходим из микроскопич. описание частиц

класс. частицы $\rightarrow$ Гамильтонов формализм используется. Значит координаты
этих частиц $q_1, \dots, q_{3N}$ и обобщ. импульсы $p_1, \dots, p_{3N}$

$$q = \{q_1, \dots, q_{3N}\} \quad H(q, p) - \text{ф-я Гамильтона}$$

$$p = \{p_1, \dots, p_{3N}\} \quad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad 6N = 2n, \quad \underline{n = 3N}$$

n - число степен. свободы $\{q_i\} \{p_i\}$ - заданные нач. условия

N - число частиц

$$H(q, p) = K(p) + U(q) \quad \text{гамильтониан}$$

кин. и пот. энергии

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

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

$$S = -k_B \cdot \frac{\partial F}{\partial \theta} = -k_B \frac{(F - \bar{H})}{\theta} =$$

$$= -k_B \int_{(x)} \left(\frac{F - H}{\theta} \right) e^{\frac{F - H(x)}{\theta}} dx = -k_B \int_{(x)} \ln e^{\frac{F - H(x)}{\theta}} \cdot e^{\frac{F - H(x)}{\theta}} dx = -k_B \cdot \overline{\ln w(x)}$$

$$S = -k_B \int_{(x)} w(x) \ln w(x) dx$$

информационная энтропия

1-ая лемма Гиббса:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial a} \left| \frac{\partial}{\partial \theta} (*) \right| &\Rightarrow \frac{\partial \bar{G}}{\partial \theta} = \int_{(x)} G(x) e^{\frac{F-H}{\theta}} \left(-\frac{1}{\theta^2} (F-H) + \frac{1}{\theta} \cdot \frac{\partial F}{\partial \theta} \right) dx = \\ &= -\frac{1}{\theta^2} \overline{(G(F-H))} + \frac{1}{\theta} \cdot \frac{\partial F}{\partial \theta} \bar{G} = -\frac{1}{\theta^2} \overline{(G(F-H))} - \frac{\bar{H} - F}{\theta^2} \cdot \bar{G} = \\ &= \frac{1}{\theta^2} (-\bar{G}/F + \bar{G} \cdot \bar{H} - \bar{H} \cdot \bar{G} + F/\bar{G}) = \boxed{\frac{1}{\theta^2} \cdot (\bar{G} - \bar{G})(\bar{H} - \bar{H}) = \frac{\partial \bar{G}}{\partial \theta}} \quad \text{1 л. Гиббса} \end{aligned}$$

$$\left\{ \begin{aligned} \bar{G}(\bar{H} - \bar{H}) &= 0 & \bar{G} \cdot \bar{H} - \bar{G} \cdot \bar{H} &= \bar{G} \cdot \bar{H} - \bar{G} \cdot \bar{H} = 0 \end{aligned} \right\}$$

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

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

$$\frac{\partial \bar{G}}{\partial a} - \frac{\partial \bar{G}}{\partial a} = \frac{1}{\theta} \cdot \left(\frac{\partial \bar{H}}{\partial a} \cdot \bar{G} - \overline{G \frac{\partial H}{\partial a}} \right) = \left\{ \overline{G \left(\frac{\partial H}{\partial a} - \frac{\partial \bar{H}}{\partial a} \right)} = 0 \right\} =$$

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

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial \theta} = -\frac{1}{\theta^2} \cdot \overline{(\bar{H} - \bar{H})^2} \quad \left/ \begin{array}{l} \text{из 1-ой} \\ \text{леммы Гиббса} \end{array} \right/$$

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

$$\overline{(\Delta U)^2}$$

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

$$\sqrt{\frac{\overline{(\Delta U)^2}}{\bar{H}^2}} = \frac{\theta}{\bar{H}} \cdot \sqrt{\frac{\partial \bar{H}}{\partial \theta}} = \frac{k_B T}{\bar{H}} \cdot \sqrt{\frac{C_V}{k_B}}$$

$$U = \bar{H} \sim N, \quad C_V \sim N$$

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

среднеквадратичная относительная флуктуация $\rightarrow 0$

$$\boxed{\begin{matrix} T, V, N & \bar{H} = U = E \\ \updownarrow & \text{эквивалентно} \\ E, V, N \end{matrix}}$$

Каждой сист. с кан. & кан. Гиббса можно приписать ср. значение энергии.

Но какая м.д. эквивалентности?

$$W_E = \frac{1}{\Omega(E, a)} \delta(E - H(x, a)) \quad \text{и} \quad W(x) = e^{\frac{F(\theta, a) - H(x, a)}{\theta}}$$

Покажем, что противоречия здесь нет.

$$F(x_1, \dots, x_n) \rightarrow \bar{F} = \iint_{\{x_1, x_2, \dots, x_n\}} F(x_1, \dots, x_n) W(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n = \int_{(F)} F \cdot \underbrace{W(F)} \cdot dF$$

$$\underbrace{W(F)} = \int \dots \int_{\{x_1, \dots, x_n\}} \delta(F - F(x_1, \dots, x_n)) dx_1 \dots dx_n W(x_1, \dots, x_n)$$

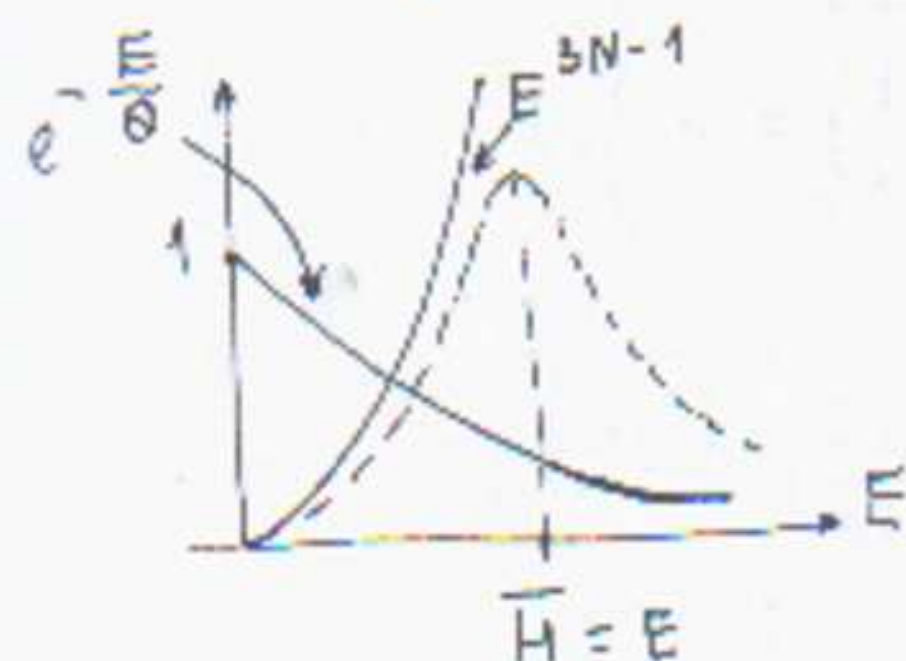
$$W(E) = \int_{(x)} \delta(E - H(x)) e^{\frac{F - H(x)}{\theta}} dx = \Omega(E) \int_{(x)} \frac{\delta(E - H(x))}{\Omega(E)} e^{\frac{F - H(x)}{\theta}} dx = \Omega(E) e^{\frac{F - H(x)}{\theta}} =$$

$$= \Omega(E) \cdot e^{\frac{F - E}{\theta}}$$

$$\Omega(E) = \frac{\partial \Gamma(E)}{\partial E}$$

$$\Gamma(E) \sim E \quad \boxed{H(x) = E}$$

$$3N \text{ и } 2\alpha \quad \Gamma(E) \sim E^{3N}, \quad \Omega(E) \sim E^{3N-1}$$



--- $\rightarrow$ произведение этих двух функций $\Omega(E) \cdot e^{\frac{F-E}{\theta}}$ имеет max в окрестности $\bar{H} = E$.

$$w(x) = e^{\frac{F(\theta, a) - H(x, a)}{\theta}}, \quad Z = \int_{(x)} e^{-\frac{H(x, a)}{\theta}} dx, \quad F = -\theta \ln Z$$

$$\bar{A}_x = -\left(\frac{\partial F}{\partial a_x}\right) \quad E = F - T \cdot \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_a, \quad S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_a \quad F' = F + C_1 \cdot \theta + C_2$$

$$x_i = \{\vec{p}_i, \vec{r}_i\} \quad H(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_{i=1}^N H_i(x_i), \quad Z = \int_{(x_1)} \dots \int_{(x_N)} e^{-\frac{H_1(x_1) + H_2(x_2) + \dots + H_N(x_N)}{\theta}}$$

$$dx_1 \dots dx_N = \int_{(x_1)} dx_1 e^{-\frac{H_1(x_1)}{\theta}} \dots \int_{(x_N)} dx_N e^{-\frac{H_N(x_N)}{\theta}} = (Z)^N, \quad Z = \int_{(x_1)} dx_1 e^{-\frac{H_1(x_1)}{\theta}}$$

$$H(x_1) = \frac{p_1^2}{2m} - mgz_1$$

$$w(x_1, \dots, x_N) = e^{\frac{F(\theta, a)}{\theta}} \cdot \prod_{i=1}^N e^{-\frac{H_i(x_i)}{\theta}}$$

$$dw(x_1, \dots, x_N) = e^{\frac{F(\theta, a)}{\theta}} \cdot \prod_{i=1}^N e^{-\frac{H_i(x_i)}{\theta}} dx_1 dx_2 \dots dx_N$$

$$w(x_1) = \left(\int_{(x_2)} \dots \int_{(x_N)} dx_2 \dots dx_N e^{-\frac{H_2(x_2) + \dots + H_N(x_N)}{\theta}} e^{\frac{F(\theta, a)}{\theta}} \right) e^{-\frac{H_1(x_1)}{\theta}} = A(\theta) e^{-\frac{H_1(x_1)}{\theta}}$$

$$\int_{(x_N)} dx_N e^{-\frac{H_N(x_N)}{\theta}} = (Z)^N$$

$$w_1(\vec{p}_1, \vec{r}_1) = A(\theta) e^{-\left(\frac{p_1^2}{2m\theta} + \frac{U(r)}{\theta}\right)}$$

распределение Максвелла-Больцмана

$$\int w_1(\vec{p}_1, \vec{r}_1) d\vec{p}_1 d\vec{r}_1 = 1 \rightarrow \text{мы знаем } w_1 \text{ и найдем const } A(\theta)$$

$$w(\vec{p}) = \int d\vec{r}_1 A(\theta) e^{-\frac{U_1(\vec{r})}{\theta}} e^{-\frac{p_1^2}{2m\theta}} = B(\theta) e^{-\frac{p_1^2}{2m\theta}} \quad \int w(\vec{p}_1) d\vec{p}_1 = 1$$

мы знаем функцию $\rightarrow B(\theta)$

$$w(\vec{r}_1) = C(\theta) e^{-\frac{U_1}{\theta}}$$

распределение частиц по координатам (Больцмана) в поле с. взаимодействий

$$\int d\vec{r}_1 w(\vec{r}_1) = 1 \rightarrow \text{найдем } C(\theta)$$

$$\underline{w(\vec{p}) d\vec{p}} \quad \vec{p}, \vec{p} + d\vec{p} \quad \vec{p} = m \cdot \vec{v} \quad w(\vec{v}) = \mathcal{A}(\theta) e^{-\frac{m v^2}{2\theta}} \quad | \cdot d\vec{v}$$

$w(\vec{v}) \cdot d\vec{v}$ - вер. на то, что частица в гашеи сечеме имеет скорость от $\vec{v}$, до $\vec{v} + d\vec{v}$

$$H = K + U \quad K = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} \quad \text{агрег. кинетич. эн.}$$

$$w(x_1) = e^{-\frac{p_1^2}{2m\theta}} \int d\vec{r}_1 \dots \int d\vec{r}_N \int d\vec{p}_2 \dots d\vec{p}_N e^{\frac{F - H_2(x_2) + \dots + H_N(x_N)}{\theta}}$$

$$\boxed{H(x_1) = \frac{p_1^2}{2m}} \quad Z = \int_V d\vec{r}_1 \int d\vec{p}_1 e^{-\frac{\vec{p}_1^2}{2m\theta}} = V \int_{-\infty}^{+\infty} dp_{1x} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_{1y} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_{1z} e^{-\frac{p_{1x}^2 + p_{1y}^2 + p_{1z}^2}{2m\theta}} =$$

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

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}} \quad \text{интеграл Гаусса}$$

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

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

$$F(2V, 2N, \theta) \neq 2F(V, N, \theta) - 2N\theta \ln 2$$

$$\boxed{N\theta (\ln N - 1) = \text{годовая}} = \theta (N \ln N - N)$$

свободная энергия слага
агрег. кинетич.

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

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

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

$$N \gg 1$$

$$\theta (N \ln N - N) \approx \ln N!$$

$$\boxed{\ln N! \approx N \ln N - N}$$

$$Z = e^{-\ln N!} \int e^{-\frac{H(x)}{\theta}} dx = \frac{1}{N!} \int_{(x)} e^{-\frac{H(x)}{\theta}} dx$$

он уже фактор Больцмана

чтобы учесть те состояния, кот. отличаются только перестановкой частиц

$$dx = dp_1 dq_1 \dots dp_{3N} dq_{3N}$$

$$Z - \text{н.с.с. разнородн} \quad Z = \frac{1}{N!} \int_{(x)} e^{-\frac{H(x)}{\Theta}} \frac{dx}{(2\pi\hbar)^{3N}}$$

$\hbar$ — универсальная постоянная

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

масса
это кинетическое
среднее
своб. энергии

ф-ла Сократа-Тетраге:

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V, N} = k_B N \left(\frac{3}{2} \ln \Theta + \ln \frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right) - 3 \ln \hbar + \frac{3}{2} \right)$$

$S = k_B N \left(\frac{3}{2} \ln \Theta + \ln V + \ln (2\pi m)^{3/2} + \frac{3}{2} \right)$ — не аддитивна
Энтропия не аддитивна

$$S(2N, 2V, \Theta) \neq 2S(N, V, \Theta) + N \ln 2$$

парадокс Гиббса объясняется не аддитив-ю энтропии

$$\Delta S = S(2V, 2N, \Theta) - 2S(V, N, \Theta) = N \ln 2$$

который это не учтено в уг. разе фактор Больцмана

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

$$E = F + T \cdot S = N k_B T \cdot \frac{3}{2} = \frac{3}{2} k_B T$$

$$E = \frac{3}{2} k_B T = \frac{3}{2} \Theta$$

Эн. уг. газа

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

$$C_V = \frac{3}{2} R \quad \text{моларная теплоемкость}$$

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = \frac{N\Theta}{V} \Rightarrow pV = N k_B T \quad \text{ур. Менделеева-Клапейрона}$$

Закон распределения энергии (кин. эн.) по степеням свободы
"th viriala"

$$\frac{1}{2} p_i \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i^2}{2m} = \frac{\Theta}{2} \quad \text{"3-й равномерное кин. эн. по степеням свободы"}$$

$$\overline{\frac{p_i^2}{2m}} = \frac{3}{2} \cdot \frac{\Theta}{2} \quad \frac{1}{2} q_i \frac{\partial H}{\partial q_i} = \frac{\Theta}{2}$$

14.03.13

Литература

$$\overline{\frac{p_k^2}{2m}} = \frac{1}{2} \overline{p_k \cdot \frac{\partial H}{\partial p_k}} = \frac{\Theta}{2}$$

$$\overline{\frac{1}{2} q_k \cdot \frac{\partial H}{\partial q_k}} = -\frac{1}{2} \overline{q_k \cdot A_k} = \frac{\Theta}{2}$$

виртуал

$$\overline{x_e \cdot \frac{\partial H}{\partial x_k}} = \Theta \delta_{ke}$$

$$\overline{p_k \cdot \frac{\partial H}{\partial p_k}} = \Theta$$

$$L = K - U$$

$$H = K + U = \sum_k p_k \cdot \frac{\partial H}{\partial p_k} - L = \sum_k p_k \cdot \frac{\partial H}{\partial p_k} - K + U \quad \sum_k p_k \cdot \frac{\partial H}{\partial p_k} = 2K$$

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

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

$$x_e = q_e \quad A_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}$$

$$x_{N+1} = p_e$$

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

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

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

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

$$\overline{p_k \cdot \frac{\partial H}{\partial p_k}} = \overline{q_k \cdot \frac{\partial H}{\partial q_k}}$$

$$\overline{U} = \overline{K} \quad (\text{th виртуал и теор. механике})$$

th равнораспределения кин. эн. по степен. свободы + th виртуал

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{\alpha q^2}{2}$$

кин. пот. эн.

$$\overline{H} = \overline{\frac{p^2}{2m}} + \overline{\frac{\alpha q^2}{2}} = \frac{\Theta}{2} + \frac{\Theta}{2} = \Theta \quad \left\| \begin{array}{l} \text{для гармонич-го} \\ \text{осциллятора} \end{array} \right.$$

$$\overline{\frac{1}{2} q \cdot \frac{\partial H}{\partial q}} = \overline{\frac{1}{2} q \cdot \frac{\alpha q}{2}} = \overline{\frac{\alpha q^2}{2}}$$

$$\boxed{\overline{H} = \Theta}$$

$$\overline{H}_{\text{ант.}} = \overline{\frac{p^2}{2m} + \frac{\alpha q^2}{2} - \beta \cdot q^4} = \overline{\frac{p^2}{2m}} + \overline{\frac{\alpha q^2}{2}} - \overline{\beta \cdot q^4} = \frac{\Theta}{2}$$

для ангармонич-го осциллятора

$$\overline{\frac{1}{2} q \cdot \frac{\partial H}{\partial q}} = \overline{\frac{1}{2} \alpha q^2 - 2\beta q^4} = \frac{\Theta}{2} + \frac{\Theta}{2} - \overline{\beta \cdot q^4} = \Theta - \overline{\beta \cdot q^4}$$

$$\overline{H}_{\text{ант.}} > \overline{H}$$

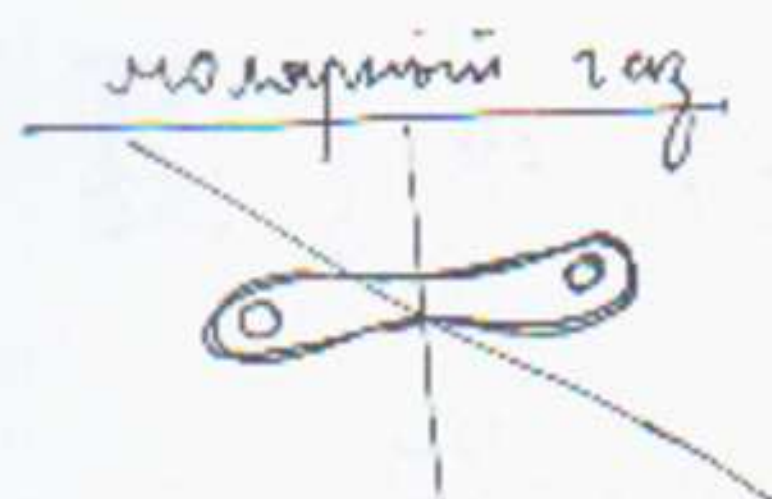
ср. эн. ангармонического осциллятора > ср. эн. гармонического осциллятора

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

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

(одноатомный газ)

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



вытянутая молекула

3 поступат. ст. д. + 2 вращат. ст. свободы } 5 степеней своб.

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

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

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

тв. тело

$(q_i - q_i^0)$ - смещения атомов от положений равновесия

размещены в гармонич. приближении:

$$H = \sum_k \frac{p_k^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_k d_{ik} (q_i - q_i^0) (q_k - q_k^0)$$

d_{ik} - потенциальная взаимод-я между атомами системы

разложим потен. эн. по малым смещениям

при $T=0$ потен. эн. имеет min значение

$T \neq 0$ возникает колебат. процесс

U_{min}

$$\left(\frac{\partial U}{\partial q_k} \right)_{q_k = q_k^0} = 0$$

потому минимум имеет в разложении нет

$$Q_k = \sum_i a_{ki} \cdot q_i + b_k$$

заменим в приведенных коорд-х: $H = \sum_{k=1}^{3N} \left(\frac{p_k^2}{2m} + \frac{d_k}{2} Q_k^2 \right) =$

$3N$ гармонич. для одностепенных гармонич. осцилляторов

$$= \sum_{k=1}^{3N} \left(p_k^2 + \omega_k^2 \cdot Q_k^2 \right)$$

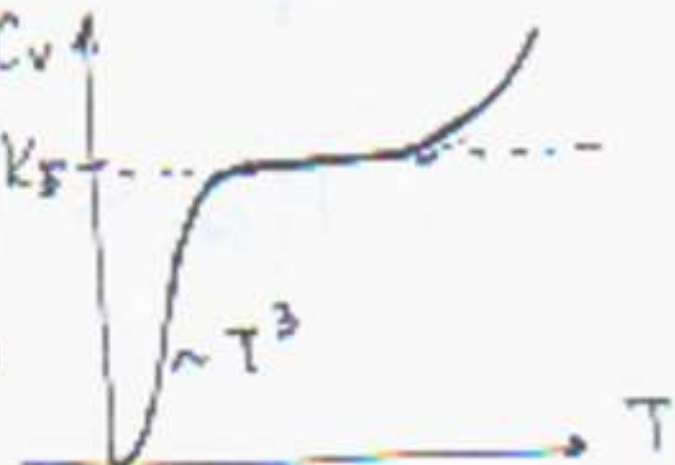
$$\begin{cases} \hbar \omega_k & \text{фононы} \\ \vec{p} = \hbar \vec{k} \end{cases}$$

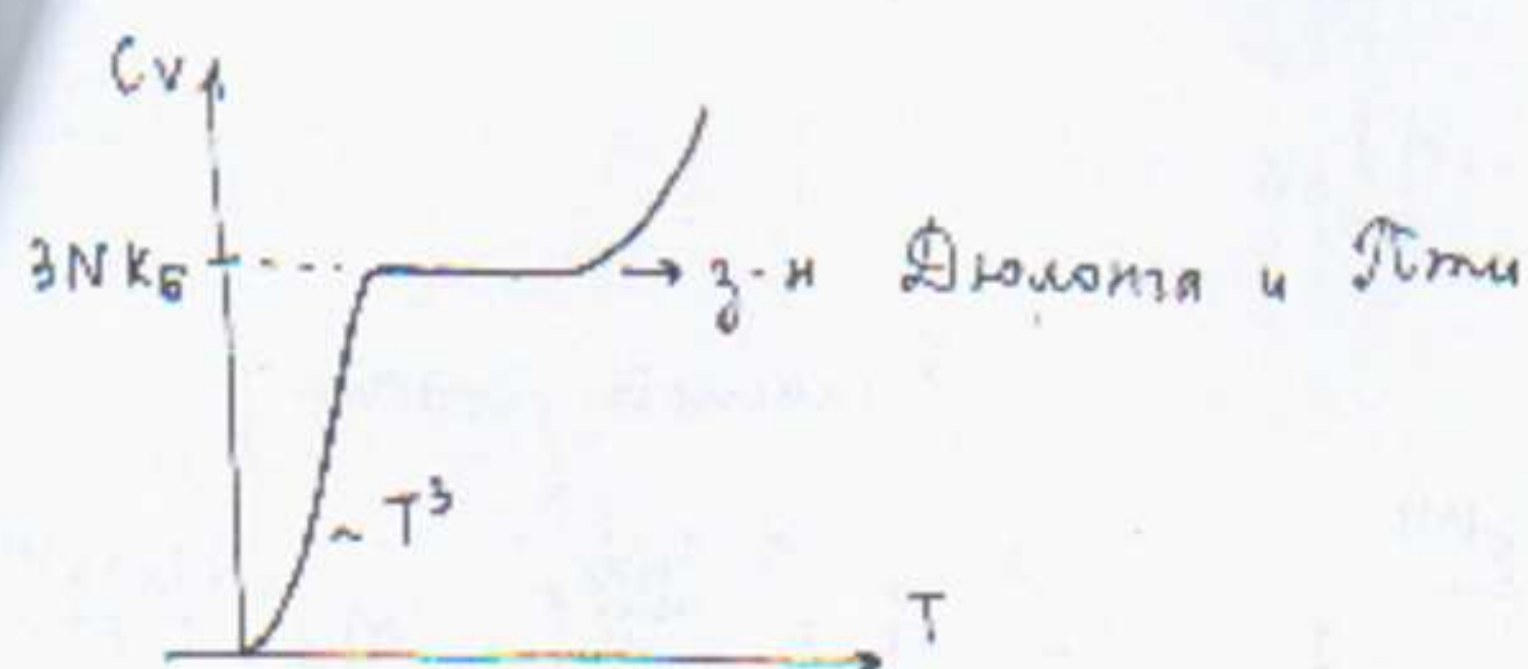
можно рассмотреть колебания крист. решетки как газ независимых фононов. C_V теплоемк. для тв. тела

$$E = \bar{H} = 3N \cdot \Theta$$

$$C_V = 3 N k_B$$

з.н. Дюлонга и Пити





Большой канонич. ансамбль Гиббса - множество термодинамич. систем,
 порождающихся 1 микросостоянием, соотв.х макросостоянием T, V

Сист. пов. в контакте с термостатом и резервуаром частицы

при фиксир. N большое канон. распрег. Гиббса ничем не будет отличаться от микроканон.-го ра. Гиббса

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

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

$$dU = T \cdot dS - \sum_k \bar{A}_k \cdot da_k + \sum_k \mu_k dN_k$$

хит. пометы.

$$dF = -SdT - \sum_k \bar{A}_k da_k + \sum_k \mu_k dN_k$$

$$dH = T \cdot dS + \sum_k a_k dA_k + \sum_k \mu_k dN_k$$

$$dG = -SdT + \sum_k a_k dA_k - \sum_k \mu_k dN_k$$

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

Большой термод. пометы. Гиббса: $\Omega = F - \mu \cdot N \quad d\mu = -\tilde{S} \cdot dT + \tilde{V} \cdot dp$

$$\boxed{\Omega_S = - \sum_k A_k a_k}$$

$$\Omega = F - \mu \cdot N = F - G = U - T \cdot S - (U - T \cdot S + p \cdot V) = -p \cdot V$$

$$\boxed{d\Omega = -S \cdot dT - p \cdot dV - N \cdot d\mu}$$

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

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

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

$$\sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} e^{\frac{\mu N}{\theta}} \cdot e^{\frac{\Omega(\theta, a, \mu)}{\theta}}$$

$$\sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} e^{\frac{\mu N}{\theta}} \frac{1}{N!} \int_{(x^{(N)})} dx^{(N)} e^{-\frac{H_N(x^{(N)})}{\theta}} = 1$$

дополной норм. ∫

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

$$\boxed{\Omega = -\theta \cdot \ln Z}$$

18.03.13.

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

$$\sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \int_{(x^{(N)})} e^{\frac{F_N(\theta, a) - H_N(x^{(N)})}{\theta}} dx^{(N)} = 1$$

T, V

$$\boxed{\Omega(T, V, \mu) = F_N(N, T, V) - \mu N}$$

с помощью предраз. Лемангра переписываем
в каноническую перепис. формулу Ω

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

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

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

дополной норм. ∫

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

$$Z = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{e^{\frac{\mu N}{\theta}}}{N!} \int_{(x^{(N)})} e^{-\frac{H_N(x^{(N)})}{\theta}} dx^{(N)}$$

$$W_{N_1, \dots, N_n} = \frac{1}{N_1! \dots N_n!} e^{\frac{\Omega + \sum_{k=1}^n \mu_k N_k - H_{N_1, \dots, N_n}(x^{(N_1)} \dots x^{(N_n)})}{\theta}}$$

$$Z = \sum_{N_1=0}^{\infty} \dots \sum_{N_n=0}^{\infty} \frac{e^{\sum_{k=1}^n \frac{\mu_k N_k}{\theta}}}{N_1! \dots N_n!} \int_{(x^{(N_1)})} \dots \int_{(x^{(N_n)})} e^{-\frac{H_{N_1, \dots, N_n}}{\theta}} dx^{(N_1)} \dots dx^{(N_n)}$$

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

микроскоп. описание системы.

$$\begin{cases} q_i = q_i(q_0, p_0, t) \\ p_i = p_i(q_0, p_0, t) \end{cases}$$

Как из микроскоп. описания получить макроскопич? $S+1$ ($S+2$)-перемен.

Сист. ТДР явл. динамич. сист. равновесия - не явл. статистич. сист.

$G(p, q)$ - некая функция динамич. перемен.

$$\bar{G}_{\text{набл.}} \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t G(q(p_0, q_0, t), p(p_0, q_0, t)) dt$$

- наблюдаемая величина (Болцман)

Макроскоп. описание хар-ся малым числом термод. пар-в $(S+1), (S+2)$

Микроскоп. описание хар-ся колоссальным числом пар-в

Нужно использ. мат. аппарат теории вероятности /ТДБС/

Усреднение произвести сложно. ТДБС предложил использ. теор. вер. вместо этого. (использ. мат. ожидание).

$$\bar{G}_{\text{набл.}} = \int w(p, q) \cdot G(p, q) dp \cdot dq$$

среднее по ансамблю ТДБС

плотность
вероятности

$$\tilde{G}_{\text{набл.}} = \bar{G}_{\text{набл.}}$$

ТДБС показал, что среднее по времени $\tilde{G}_{\text{набл.}}$ совпадает со средн. по ансамблю $\bar{G}_{\text{набл.}}$

w - плотн. вер-ти того что данное микроскоп. состояние реализует макроскоп. сист. $S+1$ ($S+2$)

Большая: N $\vec{r}_i, \vec{v}_i, (\vec{p}_i = m \cdot \vec{v}_i)$

$$\dim \mu = 6$$

(шестимерное пр-во)



иг. раз

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

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

какое число точек попадает в выделенный элемент μ -прост-ва

$$w(\vec{r}, \vec{p}, t) d\vec{r} d\vec{p} = \frac{f(\vec{r}, \vec{p}, t)}{N} \cdot d\vec{p} d\vec{r}$$

$$\Omega(T, a_1, \dots, a_N, \mu_1, \dots, \mu_N) = F_{N_1 \dots N_n}(N_1, \dots, N_n, T, V) - \sum_{k=1}^n \mu_k N_k = - \sum_{s=1}^m \bar{A}_s a_s$$

$$A_s = - \left(\frac{\partial p}{\partial a_s} \right)_{T, a, \mu}$$

$$N \rightarrow \infty \quad d\Omega = -SdT - p dV - \bar{N} d\mu \quad T, V, \bar{N}$$

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

Покажем, что среднестатистическое отклонение числа частиц $\rightarrow 0$ при большом числе частиц

бер. макс, что средн. отклонение $\rightarrow 0$ при больш. чис. ато. Г. имеет число частиц = N вероят.

$$T, V, N \leftrightarrow T, V, \bar{N}$$

$$W(N) = e^{\frac{\Omega}{\theta}} \cdot e^{\frac{\mu N' - F_{N'}(\theta, a)}{\theta}} = \frac{1}{N!} \int e^{-\frac{H_N(x_N)}{\theta}} dx^{(N)} e^{\frac{\Omega}{\theta}} \quad a=V$$

$$\left\{ \underline{N = N'} \quad \max W(N') = W(N) \right\} \text{ хотим показать, что } W(N') \text{ имеет макс при } \underline{N = N'}$$

$$\text{условия экстремальности: } \frac{\partial W(N')}{\partial N'} = 0, \quad \frac{\partial^2 W(N')}{\partial N'^2} < 0$$

$$e^{\frac{\mu N}{\theta}} \int dx_N \cdot \frac{1}{N!} \left(e^{\frac{\Omega}{\theta}} \right) e^{-\frac{H_N(x_N)}{\theta}} = W(N) = e^{\frac{\mu N}{\theta}} \cdot e^{-\frac{F_N(\theta, N)}{\theta}} \cdot \left(e^{\frac{\Omega}{\theta}} \right)$$

$$\underline{F = \mu - T \cdot S}$$

$$F_{N'} = N! \cdot f(\tilde{N}, \theta) \quad \tilde{N} = \frac{V}{N'} \quad \frac{\partial W(N')}{\partial N'} = e^{\frac{\Omega}{\theta}} \cdot e^{\frac{\mu N' - F_{N'}}{\theta}} \cdot \left(\mu - \frac{\partial F_{N'}}{\partial N'} \right) = 0$$

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

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

$$\frac{\partial^2 F}{\partial N'^2} > 0 \quad \frac{\partial^2 F}{\partial N'^2} = \frac{\partial}{\partial N'} \left(\frac{\partial F}{\partial N'} \right) = \frac{\partial f}{\partial \tilde{N}} \cdot \frac{\partial \tilde{N}}{\partial N'} + \frac{\partial^2 f}{\partial \tilde{N}^2} \cdot \tilde{N} \cdot \frac{V}{N'^2} - \frac{\partial f}{\partial \tilde{N}} \cdot \frac{\partial \tilde{N}}{\partial N'} = \frac{\partial^2 f}{\partial \tilde{N}^2} \cdot \frac{\tilde{N}^2}{N}$$

$$df = -\tilde{S}dT - p d\tilde{V}$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \tilde{V}}\right)_T = -p; \quad \frac{\partial^2 f}{\partial \tilde{V}^2} = -\left(\frac{\partial p}{\partial \tilde{V}}\right)_T$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \tilde{V}}\right)_T < 0$$

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

{ программа $F_N(\theta, a)$ и табл по $N-N'$ } $a = V$

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

$$= e^{\frac{\mu}{\theta}} \cdot e^{\frac{\mu N - F_N(\theta, V)}{\theta}} \cdot e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial N'^2}\right)_{N=N'} (N' - N)^2}{\theta} = w(N) e^{\frac{\frac{1}{2} \left(\frac{\partial p}{\partial \tilde{V}}\right)_T (N' - N)^2 \tilde{V}^2}{\theta}}$$

$$= w(N) e^{-\frac{\left|\left(\frac{\partial p}{\partial \tilde{V}}\right)_T\right| (N' - N)^2 \tilde{V}^2}{2\theta}}$$

$$\left(\mu - \frac{\partial F}{\partial N}\right) (N' - N)$$

$$\delta N = N' - N$$

$$\overline{(\delta N)^2} = \frac{2\theta}{\left|\left(\frac{\partial p}{\partial \tilde{V}}\right)_T\right| \tilde{V}^2} = \frac{2\theta N^2}{\left|\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T\right| V^2 N}$$

$$\tilde{V} = \frac{V}{N}$$

среднеквадр. — статистическая мера расхождений от макс значения:

$$\tilde{\sigma}_N = \sqrt{\frac{\overline{(\delta N)^2}}{N^2}} = \sqrt{\frac{2\theta N}{\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T N^2}} \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0$$

$$e^{-\frac{(\delta x)^2}{2\sigma^2}} = e^{-\frac{(\delta x)^2}{2(\overline{\delta x^2})}}$$

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial N'^2}\right)_{N=N'} = -\left(\frac{\partial p}{\partial \tilde{V}}\right)_T \tilde{V}^2 = -\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T \frac{V^2}{N}$$

$$\overline{(\delta x^2)} = \sigma^2$$

$$Z = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{e^{\frac{\mu N}{\theta}}}{N!} \cdot \int e^{-\frac{H(x^N)}{\theta}} dx^{N!} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{e^{\frac{\mu N}{\theta}}}{N!} \cdot \underbrace{Z_N}_{\text{однородная мера } f}$$

↓
однородная мера f

полная информация для любой системы

энтропия $S = -k_B \ln w = -k_B \int dx \cdot w(x) \ln w(x) = -k_B \int dx \cdot \frac{F - H(x)}{\theta} \cdot w(x)$

$U = F - T \cdot S$ $w(x) = e^{\frac{F - H(x)}{\theta}}$

$$S = \frac{U - F}{T}$$

$$S = -k_B \int dx \cdot \frac{F - H(x)}{\theta} \cdot w(x) \quad (*)$$

информационная энтропия

Энтропия - есть величина, хар-я состоянию. Число состояний

$$S = k_B \ln \Gamma = \left\{ \Gamma = \int dp dq \right\}_{H(p,q) \leq E} = S = k_B \ln \Omega \cdot \Delta E = k_B \ln \frac{\partial \Gamma}{\partial E} \cdot \Delta E = S \quad (**)$$

Ω - есть объем, занимаемый между двумя соседними состояниями

$$H(p,q) = E \text{ и } H(p,q) = E + \Delta E$$

$$\Omega \cdot \Delta E = \text{состоян. бес}$$

$$N \rightarrow \infty$$

$$\Gamma(E) \sim E^{\frac{3}{2}N} \quad \dim \Gamma = 6N$$

объем для непрерывной функции $\Rightarrow S = k_B \cdot \ln \Gamma \cdot \frac{3}{2}N \cdot \Delta E = k_B \ln \Gamma +$

$$+ k_B \cdot \ln \frac{3}{2}N \cdot \frac{\Delta E}{E}$$

состоян. бес - кол-во квантов состояний, которые имеют заданное значение энергии

$$N \sim 10^{22}$$

$$\ln N \approx 22 \ln 10$$

Эти определения энтропии (*) и (**) - эквивалентны.

Математическая теория информации

$S = -k_B \int dx \cdot \frac{F - H(x)}{\theta} w(x)$ опред. энтропии по Тьюби (справедливо как и для вероятностной системы)

для обратимых процессов дает возможность обобщения II-го начала ТД, как з-н возрастания энтропии (энтроп. не меняется а в сост. ТДР достигает своего макс)

w_n - вероятности realization n -го квант.-го состояния

$$S = -k_B \sum_n w_n \ln w_n, \quad \sum_n w_n = 1 \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{аналог условия нормировки} \\ \int_{(x)} w(x) dx = 1, \quad w(x) \geq 0 \end{array} \right\}$$

if есть дискретные квант. состояния

① Рассмотрим случай, когда система нах. в оди. кб. состоянии:
Энтропия такой сист. = 0

$$w_{n_0} = 1 \quad \underline{S = 0} \quad n = n_0$$

② Система принимает значения $n = 1, \dots, A$ вероятности появ. каждого состояния $w_n = \frac{1}{A}$ (равновероятны эти состояния)

$S_{\max}$ - Энтропия принимает max знач. при $w_n = \frac{1}{A}$ (полный хаос)

Энтропия явл. характеристикой степени упорядоченности системы

3. Энтропия двух слуг. величин: $S[x, y] = -k_B \int dx \int dy w(x, y) \ln w(x, y)$

Для двух слуг. величин можно ввести

понятие условной вероятности: $w(x, y) = w(x|y) \cdot w(y) = w(y|x) \cdot w(x)$

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

для статистически-независимых величин: $w(x, y) = w(x) \cdot w(y)$

$$w(x|y) = w(x)$$

блогим понятие

4. Условная энтропия $S[x|y] = -k_B \int \int dx dy w(x, y) \ln w(x|y)$

$$\begin{aligned} S[x|y] &= S[x, y] - S[y] \\ S[y|x] &= S[x, y] - S[x] \end{aligned} \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{гол. условие как } S \text{ уменьшается} \\ \text{независимости слуг. величин.} \end{array} \right.$$

$$\begin{aligned} S[x|y] &\leq S[x] \\ S[y|x] &\leq S[y] \end{aligned} \quad \Leftrightarrow \quad \boxed{\ln a \geq (1 - \frac{1}{a})} \quad \text{матем. раз-во}$$

из него следуют эти соотношения

⑤ Униформная: $I(x) = S(x) - S(x|y) \geq 0$ (определение униформности по Менону)

$$S(t) = -k_B \int_{(x)} w(x, t) \ln w(x, t) dx$$

Th. Тисса:

$$E = \int_{(x)} H(x) \cdot w(x) dx = \text{const};$$

$$w(x) = e^{\frac{F - H(x)}{\Theta}}$$

каноническое распределение Тисса

$$w_1(x) \quad \int_{(x)} w_1(x) dx = 1$$

$$E = \int_{(x)} H(x) \cdot w_1(x) dx$$

попытки, чтобы
вероятности $w_1(x)$
давали то же значение
энергии E .

$$S_1 = -k_B \int_{(x)} dx \cdot w_1(x) \cdot \ln w_1(x)$$

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

Энтропия, вычисленная с каноническим распределением Тисса будет
больше, чем энтропия, вычисленная с любым другим распределением.

if $w(x) = w_1(x)$ только в этом случае $S(x) = S_1(x)$

Докажем это:

$$\text{зададим } w_1(x) = \exp \left(\frac{F_1 - H(x) - U_1(x)}{\Theta} \right)$$

$U_1(x)$ - произвольная
функция

Из условия нормировки определяется F_1 : $\int_{(x)} w_1(x) dx = 1$

$$e^{-\frac{F_1}{\Theta}} = \int_{(x)} e^{-\frac{H(x) - U_1(x)}{\Theta}} dx$$

$$S(x) - S_1(x) = -k_B \int_{(x)} dx \left[e^{\frac{F - H(x)}{\Theta}} \cdot \left(\frac{F - H(x)}{\Theta} \right) - e^{\frac{F_1 - H(x) - U_1(x)}{\Theta}} \cdot \frac{F_1 - H(x) - U_1(x)}{\Theta} \right]$$

$$\left\{ \int_{(x)} e^{\frac{F - H(x)}{\Theta}} dx = \int_{(x)} e^{\frac{F_1 - H(x) - U_1(x)}{\Theta}} dx = 1 \right\}$$

$$= -k_B \int_{(x)} dx \cdot e^{\frac{F_1 - H(x) - U_1(x)}{\Theta}} \cdot \left(\frac{F - F_1 + U_1(x)}{\Theta} \right) \quad \text{⑥}$$

$$F - F_1 + u_1(x) = \eta$$

$$e^{\frac{F_1 - H(x) - u_1(x)}{\theta}} = e^{\frac{F - H(x) + \eta}{\theta}}$$

$$\eta = \frac{k_B}{\theta} \int_{(x)} dx e^{\frac{F - H(x) + \eta}{\theta}} \eta$$

25.03.13.

$$w = e^{\frac{F - H(x)}{\theta}}; \quad w_1 = e^{\frac{F_1 - H(x) - u_1(x)}{\theta}}$$

$$\eta = \frac{F_1 - F - u_1(x)}{\theta}$$

$$S - S_1 = -k_B \int_{(x)} \left(\frac{F - H(x)}{\theta} e^{\frac{F - H(x)}{\theta}} - \frac{F_1 - H(x) - u_1(x)}{\theta} e^{\frac{F_1 - H(x) - u_1(x)}{\theta}} \right) dx =$$

$$= \left\{ \int_{(x)} dx e^{\frac{F - H(x)}{\theta}} = \int_{(x)} dx e^{\frac{F_1 - H(x) - u_1(x)}{\theta}} = 1 \right\} = -k_B \int_{(x)} e^{\frac{F_1 - H(x) - u_1(x)}{\theta}} \left(\frac{F - F_1 + u_1(x)}{\theta} \right) dx$$

$$= k_B \int_{(x)} \eta e^{\frac{F - H(x)}{\theta}} \cdot e^{\frac{F_1 - F - u_1(x)}{\theta}} dx = k_B \int_{(x)} e^{\frac{F - H(x)}{\theta}} \underbrace{(\eta e^{\eta} + 1 - e^{\eta})}_{\geq 0} dx \geq 0 \quad \eta = 0$$

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

$$S \geq S_1$$

$$\ln a \geq 1 - \frac{1}{a}$$

$$a = e^{\eta}$$

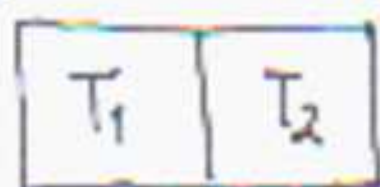
$$a \ln a + 1 - a = a \left(\ln a + \frac{1}{a} - 1 \right)$$

$w_1(x, t)$ - это нормир. б.р.

$$\int_{(x)} dx w_1(x, t) H(x) = \int_{(x)} w(x) \cdot H(x) \cdot dx$$

След. макс. б. работности
состояния (макс. обмен энтропией
мешку поглотителями)

Т.е.



$$\int_{(x)} dx w_1(x, t) dx = 1$$

$$S_1(t) = -k_B \int_{(x)} w_1(x, t) \cdot \ln w_1(x, t) dx$$

$$H_{b3} \ll H_1, H_2$$

$$\frac{H_{b3}}{H} \ll 1$$

Об. ба нугаанонна разоб.

Мемогн класс. статистикуну гурь ошканне об-б нуг. x разоб.

$$H(p, q) = E(p, q) = \sum_{\alpha=1}^N \frac{\vec{p}_{\alpha}^2}{2m} + U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$$

Рассчитаем огибающую раз.
$$Z = \frac{1}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} \int_{(r)} e^{-\frac{H(p, q)}{\theta}} d\vec{p}_1 \dots d\vec{p}_N dV_1 \dots dV_N \quad (*)$$

$$dV_{\alpha} = dx_{\alpha} dy_{\alpha} dz_{\alpha}$$

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

Считаем раз. на основании предположения, что взаимодействие молекул зависит от расстояния U_{12} $U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = 0$ $\int_V \dots \int_V dV_1 \dots dV_N e^{-\frac{U}{\theta}} = V^N$

$$F = -\theta \ln Z \quad \left\{ (*) \cdot \frac{V^N}{V^N} \right\}$$

$$\left\{ F = -\theta \ln Z = F_{ug} - \frac{\theta}{V^N} \int_V \dots \int_V dV_1 \dots dV_N (e^{-\frac{U}{\theta}} - 1) \right. \quad ? \quad \left. \right\}$$

$$\ln Z = \ln \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N} N!} + \ln \int \dots \int d\vec{p}_1 \dots d\vec{p}_N e^{-\sum_{k=1}^N \frac{\vec{p}_k^2}{2m}} + \ln \int_V \dots \int_V dV_1 \dots dV_N e^{-\frac{U}{\theta}} +$$

$$+ \ln V^N - \ln V^N$$

$$F = -\theta \ln Z = F_{ug} - \theta \cdot \ln \left(\frac{1}{V^N} \int_V \dots \int_V dV_1 \dots dV_N e^{-\frac{U}{\theta}} \right) = F_{ug} -$$

Значо нар $\frac{N(N-1)}{2} \approx \frac{N^2}{2} \quad N \gg 1$

$$- \theta \cdot \ln \left(\frac{1}{V^N} \cdot \frac{N^2}{2} \int_V \dots \int_V dV_1 \dots dV_N e^{-\frac{U_{12}}{\theta}} \right) = F_{ug} - \theta \cdot \ln \frac{N^2}{2V^2} \iint dV_1 dV_2 e^{-\frac{U_{12}}{\theta}}$$

$$Z = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}} \cdot \frac{1}{N!} \int_{(r)} e^{-\frac{H(p,q)}{\theta}} d\vec{p}_1 \dots d\vec{p}_N dV_1 \dots dV_N = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}} \frac{1}{N!} \int_{(r)} e^{-\frac{\sum \frac{p_i^2}{2m}}{\theta}} d\vec{p}_1 \dots d\vec{p}_N$$

$$\cdot \int_V \dots \int_V dV_1 \dots dV_N (e^{-\frac{U}{\theta} + 1} - 1) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}} \frac{1}{N!} \int \dots \int d\vec{p}_1 \dots d\vec{p}_N e^{-\frac{K(p)}{\theta}} \cdot (V^N +$$

$$+ \int_V \dots \int_V dV_1 \dots dV_N (e^{-\frac{U}{\theta}} - 1))$$

$$F =$$

$$= F_{ug} - \theta \ln(1 + \frac{1}{V^N} \int_V \dots \int_V dV_1 \dots dV_N (e^{-\frac{U}{\theta}} - 1)) = F_{ug} - \theta \ln(1 + \frac{1}{V^{3N}} \cdot \frac{N^2}{2} \cdot V^{N-2} \cdot$$

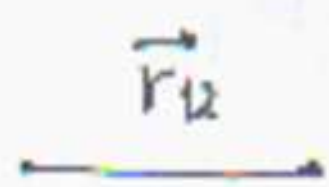
$$\cdot \int \int dV_1 dV_2 (e^{-\frac{U_{12}}{\theta}} - 1))$$

$$F = F_{ug} - \theta \cdot \frac{N^2}{2V^2} \cdot \int \int dV_1 dV_2 (e^{-\frac{U_{12}}{\theta}} - 1) = F_{ug} - \theta \cdot \frac{N^2}{V^2} \cdot B(T)$$

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

$$\ln(1+x) \approx x$$

$$U_{12} = U_{12}(\vec{r}_{12})$$



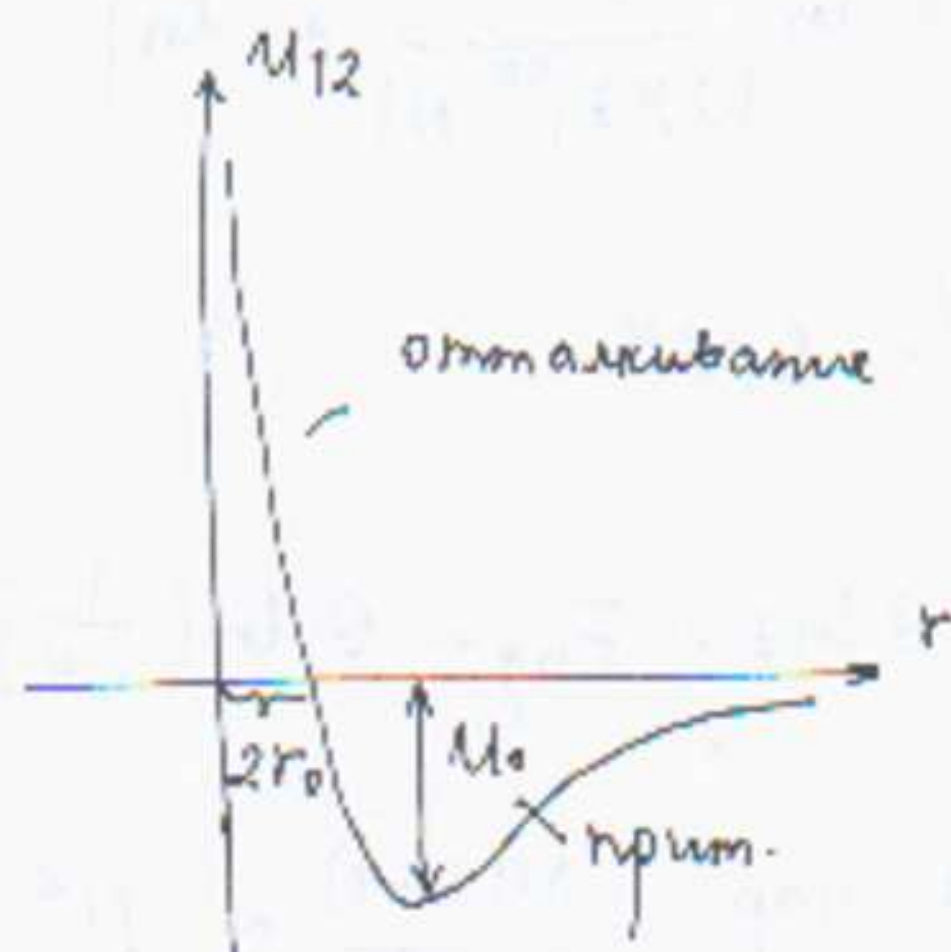
$$\int \int dV_1 dV_2 (e^{-\frac{U_{12}}{\theta}} - 1) =$$

$$= V \int d\vec{r}_{12} (e^{-\frac{U_{12}(\vec{r}_{12})}{\theta}} - 1)$$

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

$$p = \frac{N\theta}{V} + \theta \cdot \frac{N^2}{V^2} \cdot B(T)$$

уравнение Бойля



$$1. \frac{U_0}{k_B T} \ll 1 \quad r \approx 2r_0 \quad B(T) < 0$$

$$2. \frac{U_0}{k_B T} \gg 1 \quad r > 2r_0 \quad B(T) > 0$$

$$B(T_B) = 0$$

температура Бойля

27.03.13.

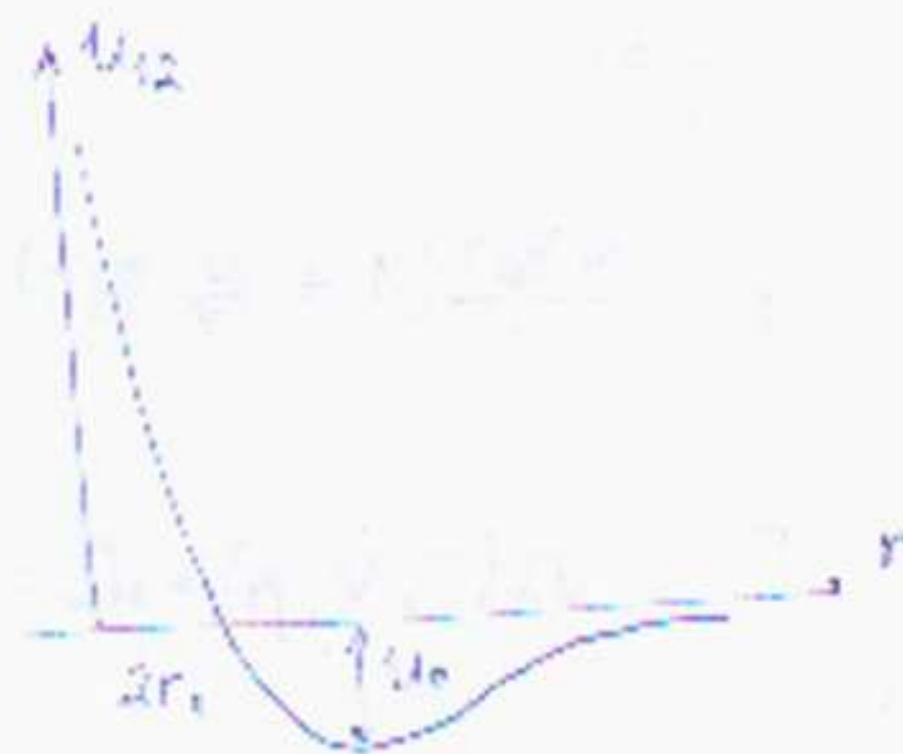
$$p = \frac{N k_B T}{V} \left(1 + \frac{N}{V} B(T) \right) \quad B(T) = \frac{1}{2} \int \left(1 - e^{-\frac{U_{12}}{\theta}} \right) dN$$

$$B(T) > 0 \quad \frac{U_{12}}{\theta} \ll 1 \quad r > 2r_0 \quad |U_{12}| \leq U_0$$

$$r < 2r_0 \quad U_{12} > U_0$$

$$\frac{U_{12}}{\theta} \gg 1 \quad e^{\frac{|U_{12}|}{\theta}} \rightarrow \infty \quad B(T) < 0 \quad B(T_B) = 0$$

$$r < 2r_0$$



$$U_0 \sim \frac{1}{r^2} \quad U_{12} \sim \frac{1}{r^2}$$

$$p = \frac{N k_B T}{V} \left(1 + \frac{N}{V} B(T) \right) \quad B(T) = 2\pi \left[\int_0^{2r_0} \left(1 - e^{-\frac{|U_{12}|}{\theta}} \right) r^2 dr + \int_{2r_0}^{\infty} \left(1 - e^{+\frac{|U_{12}|}{\theta}} \right) r^2 dr \right] =$$

$$= \frac{16}{3} \pi r_0^3 - \frac{a}{\theta} = b - \frac{a}{\theta}$$

$$b = \frac{16}{3} \pi r_0^3$$

$$a = 2\pi \int_{2r_0}^{\infty} |U_{12}| r^2 dr$$

$$F = F_{\text{ug}} + \frac{N^2 \theta}{V} B(T)$$

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

$$F = F_{\text{ug}} + \frac{N^2}{V} (b \theta - a) \quad F_{\text{ug}} = - N \theta \ln \left[\frac{2V}{N} \left(\frac{m T k_B}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \right] = N \ln(T) - N \theta \ln \frac{2V}{N}$$

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

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

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

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

$$\ln \left(1 - \frac{N \theta}{V} \right) = \ln \frac{V - N \theta}{V} = \ln(V - N \theta) - \ln V \quad \left(p + \frac{N^2}{V^2} a \right) (V - N \theta) = N \theta$$

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

Упр-е соответствует квантованной энергии | энергия упр-е соответствует кванту энергии

$$p = \frac{Nk_B T}{V} \left(1 + \frac{N}{V} B(T) + \frac{N^2}{V^2} C(T) + \frac{N^3}{V^3} D(T) + \dots \right)$$

Упр-е соответствует кванту энергии
один квант энергии кванта
с учетом всех взаимодействий

$$F \quad \Omega(T, V, N) = \Omega = F - \underbrace{\mu N}_{G} = -pV$$

$$n=0 \quad H_0 = 0$$

$$n=1 \quad H_1(p, q) = \frac{p^2}{2m}$$

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

$$n=3 \quad H_3(p, q) = \sum_{i=1}^3 \frac{p_i^2}{2m} + U_{123}, \quad U_{123} \neq U_{12} + U_{13} + U_{23}$$

объем максимизируем $\int = \frac{e^{-\frac{H}{\theta}}}{(2\pi\theta)^3} \int e^{-\frac{p^2}{2m\theta}} d^3p = e^{-\frac{H}{\theta}} \left(\frac{m\theta}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} = \frac{p_{th}}{T}$

$$\frac{p^2}{2m\theta} = \frac{p_1^2}{2m\theta} + \frac{p_2^2}{2m\theta} + \frac{p_3^2}{2m\theta}$$

$$\Omega = -pV = -\theta \ln \left[1 + \frac{p_{th}}{T} V + \frac{p_{th}^2}{2!} \int \int e^{-\frac{U_{12}}{\theta}} dV_1 dV_2 + \frac{p_{th}^3}{3!} \int \int \int e^{-\frac{U_{123}}{\theta}} dV_1 dV_2 dV_3 + \dots \right]$$

$$= -\theta \ln \left[1 + \frac{p_{th}}{T} V + \frac{p_{th}^2}{2!} \int \int e^{-\frac{U_{12}}{\theta}} dV_2 + \frac{p_{th}^3}{3!} \int \int \int e^{-\frac{U_{123}}{\theta}} dV_2 dV_3 + \dots \right] \quad \textcircled{=}$$

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \dots$$

$$\textcircled{=} -\theta V \left[\frac{p_{th}}{T} + \frac{p_{th}^2}{2!} \int \int e^{-\frac{U_{12}}{\theta}} dV_2 + \frac{p_{th}^3}{3!} \int \int \int e^{-\frac{U_{123}}{\theta}} dV_2 dV_3 + \dots \right] = -\frac{1}{2} \left(\frac{p_{th}}{T} + \frac{1}{3} \left(\dots \right)^3 \right) \theta = 3$$

$$p = \theta \sum_{n=1}^{\infty} \frac{y_n}{n!} \beta^n$$

$$y_1 = 1, \quad y_2 = \int \left(e^{-\frac{U_{12}}{\theta}} - 1 \right) dV_2, \quad y_3 = \int \int \left(e^{-\frac{U_{123}}{\theta}} - e^{-\frac{U_{12}}{\theta}} - e^{-\frac{U_{13}}{\theta}} - e^{-\frac{U_{23}}{\theta}} + 1 \right) dV_2 dV_3$$

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T,V} \quad \frac{\partial \beta}{\partial \mu} = -\frac{1}{\theta} \beta \quad N = V \left(\frac{\partial p}{\partial \mu} \right)_{T,V} = V \sum_{n=1}^{\infty} \frac{y_n}{(n-1)!} \beta^{n-1}$$

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

$$\bar{v} = \int \frac{f(\vec{r}, \vec{v}, t) \vec{v} d\vec{r} d\vec{v}}{N}$$

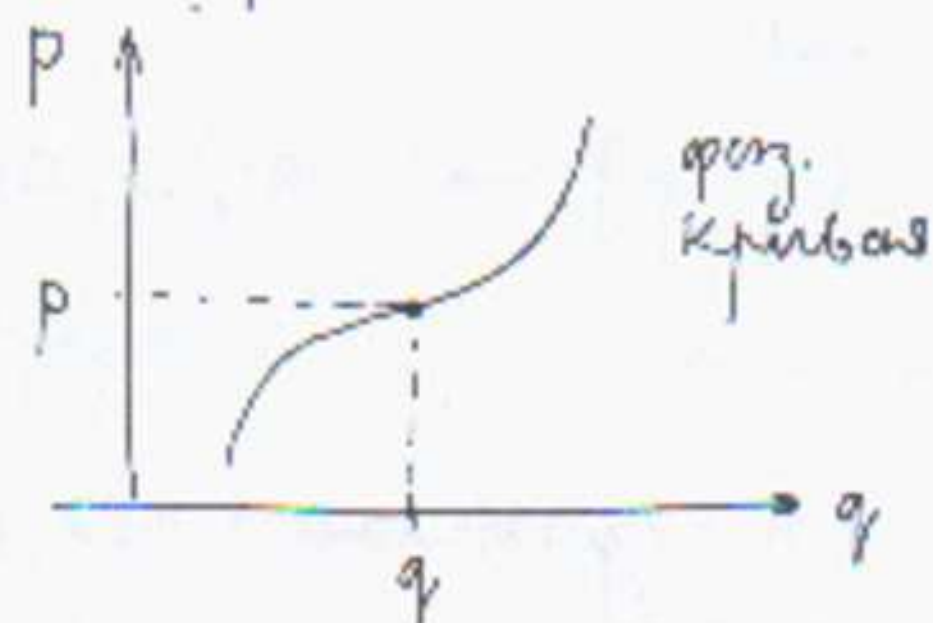
$$\int w(\vec{p}, \vec{r}) d\vec{p} d\vec{r} = 1$$

ср. знан. скорости

Болуццани: бвеи понятие μ -простр-ва и плотн. вероятности.

Туддс: вводит фазовое пр-во, $\dim \Gamma = 6N$

аналог μ -простр-ва



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

$$\frac{dq_1}{dp_1} = - \frac{\frac{\partial H}{\partial p_1}}{\frac{\partial H}{\partial q_1}}$$

$$\frac{dq_{3N}}{dp_1} = - \frac{\frac{\partial H}{\partial p_{3N}}}{\frac{\partial H}{\partial q_1}}$$

$$\frac{dp_2}{dp_1} = \frac{\frac{\partial H}{\partial q_2}}{\frac{\partial H}{\partial q_1}}$$

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

$6N-1$

Эти ур-я не содержат время $t \rightarrow$ их решение дает нам $\int$ движение

$$\Phi_1(p, q) = \alpha_1 \dots$$

$$\Phi_{3N}(p, q) = \alpha_{3N}$$

$$\alpha_1 = H(p, q)$$

гамильтониан системы

$$\Psi_2(p, q) = \beta_2 \dots$$

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

уравнение интэрплексности - каждое из этих ур-в

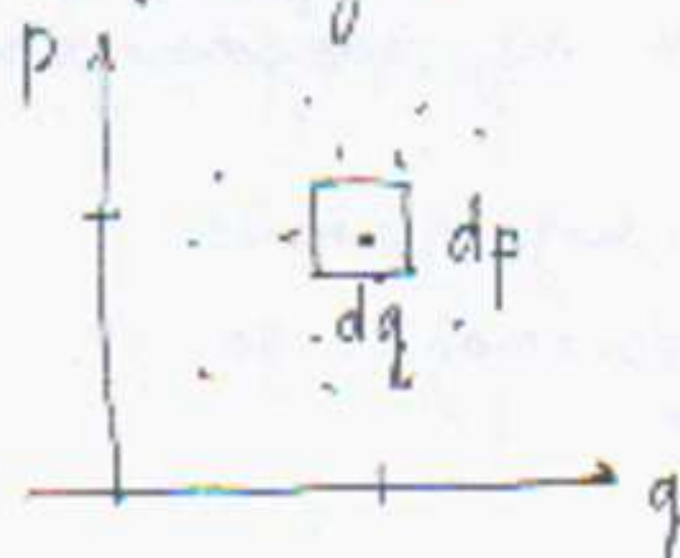
$$\Psi(p, q) = t + p_s$$

фаз. пространство лежит на пересечении интэрплексностей, кот. опред. $\int$ движение

Каждый интервал движения задает интэрплексность потенциальной

def: ансамбль — {мн-во независимых между собой систем, каждое из которых находится в своем микрокон. состоянии реализующем заданное макрокон. состояние}

Вд- раз этих систем (потому независимые системы!)



$$d\Omega(p, q) = \rho(p, q) dp dq$$

плотн. числ систем

плотности числ систем, находя в элементе ансамбля Туддса.

$n=1$

$$\begin{cases} p = 0 \\ N = V \cdot f \end{cases}$$

$$f = \frac{N}{V}, \quad p = \frac{0 \cdot N}{V}$$

$$p = \frac{0 \cdot N}{V} = \frac{T \cdot k_B \cdot N}{V}$$

уп-е соот-я
идеального газа

$n=2$

урав
гравитации
взаимодействия

$$\begin{cases} p = 0 \\ N = V \left(f + \frac{y_2^2}{2} f^2 \right) \end{cases} \Rightarrow$$

$$p = 0 \cdot \frac{N}{V} \left(1 - \frac{N}{2V} y_2 \right)$$

if $B = -\frac{1}{2} y_2$ то это уп-е переходит
к уп-ю Дюана

от 04.13.

$Z_a e$

$$\frac{1}{r^3}$$

напряж

$$Z_a = \pm 1, \pm 2, \dots$$

n_{a0} - равновесная плотность и соот. ТДР

уп-е координатных пл:

$$\sum_a Z_a e \cdot n_{a0} = 0, \quad \frac{(Z_a e)^2}{r}$$

Рассматриваем уг. пл (уч-е идеальности)

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

Кинетич. энергия порядка
Больше энергии

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

$$n^{1/3} \cdot (Z_a e)^2 \ll T$$

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

это условие должно быть в
области высоких температур

Еккер - ?

Метод Дебая-Гюкенса (1923 год)

функция ион с зарядом $Z_b e$; ионы ионы взаимодействуют с ионом



$\rho_a(r)$

γ - потенциал, созд. этим ион

$Z_a e \cdot \gamma$ - энергия V иона в поле иона $Z_b e$

$$\rho_a(r) = \frac{C_a \cdot e}{k_B \cdot T} = \frac{Z_a e \gamma}{k_B \cdot T}$$

распределение Больцмана - распределение частиц в потенциальном поле

$$\Delta\psi = -4\pi e \sum_a z_a n_a \quad (\text{упр-е Ландау})$$

Вспомог. метр, что было бы при излучении, поэтому в раз

$$\Delta\psi = -4\pi e \sum_a z_a n_a \left(1 - \frac{z_a \psi}{k_B T}\right) \Rightarrow \Delta\psi = 4\pi e^2 \sum_a \frac{z_a^2 n_a}{k_B T} \psi = 0$$

(из упр-е излучения)

Нужно найти реш-е упр-е Ландау в сферич. координ. системе:

$$\Delta^2 = 4\pi e^2 \sum_a \frac{z_a^2 n_a}{k_B T} = \frac{1}{r_{De}^2}; \quad \Delta\psi = \left(4\pi e^2 \sum_a \frac{z_a^2 n_a}{k_B T}\right) \psi = 0$$

$$\Delta\psi - \Delta^2 \psi = 0$$

$$\psi = C \cdot \frac{e^{-\Delta r}}{r} = \frac{z_b \cdot e}{r} e^{-\Delta r}$$

де-моне

$$\psi = \frac{z_b e}{r} - z_b e \Delta + \frac{1}{2} z_b e \Delta^2 r - \dots; \quad E_{\text{корр}} = \frac{1}{2} \sum_a e \cdot z_a \psi_a \cdot n_a$$

при $r \rightarrow 0$ $\psi = \underbrace{\frac{z_b e}{r}}_{\text{потенциал иона}} - \underbrace{z_b e \Delta}_{\text{то, что мы имеем} \rightarrow \text{потенциал, с которым взаимодействуют остальные ионы на газовой}} + \frac{1}{2} z_b e \Delta^2 r - \dots$ потенциал всех ионов

$$E_{\text{корр}} = -\frac{1}{2} \sum_a (e \cdot z_a)^2 n_a \Delta$$

$$E_{\text{корр}} = \frac{1}{2} V \left[- \sum_a (e \cdot z_a)^2 n_a \sqrt{\frac{4\pi e^2 \sum_a z_a^2 n_a}{k_B T}} \right] = \left\{ \begin{array}{l} \text{энергия взаимодей-я в пл} \\ \text{ионов между собой} \end{array} \right\}$$

$$= -\frac{1}{2} V (4\pi)^{1/2} \left(\sum_a (e \cdot z_a)^2 n_a \right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{k_B T}}$$

$$E = T \cdot S + F \quad E = F - T \cdot \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V \quad \frac{E}{T^2} = \frac{F}{T^2} - \frac{1}{T} \cdot \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = - \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T} \right)$$

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

Можно найти добавку, связанную с взаимодей-ем ионов в пл между собой

$$\int dT \left(\frac{1}{T} \right)^{3/2} = -\frac{2}{5} T^{-1/2} \quad F = F_{ug} - \frac{2}{5} \cdot \frac{V}{2} (4\pi)^{3/2} \frac{\left(\sum_a |e \cdot z_a|^2 N_a \right)^{3/2}}{T^{3/2 + 1/2}} T =$$

$$= F_{ug} - \frac{2}{5} \cdot \pi^{1/2} \frac{\left(\sum_a |e \cdot z_a|^2 N_a \right)^{3/2}}{\sqrt{V T}} \quad N = \sum_a N_a$$

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = \frac{NT}{V} - \frac{1}{2} \cdot \frac{\pi^{1/2} \left(\sum_a |e \cdot z_a|^2 N_a \right)^{3/2}}{V^{3/2} T^{1/2}}$$

Рассмотрим квантовую систему, поместим темп-ру, ↑ плотность, начнем считать квант. эффект.

Появляется пр. н. неопределенности Гейзенберга, нет фазового пр-ва, не могу одновременно задать коорд. и импульс

Работаем в гильбертовом пространстве пр-ва, каждой физ. величине ставим в соответствие эрмитов оператор.

Будем вводить бра- и кет-векторы;

$$\langle a | \quad | a \rangle$$

И операторы коммутируют, но эти величины н.д. одновременно измерены.

Комплексное линейное пр-во: $|a\rangle^* = \langle a|$ (и наоборот) ↑ комплексное сопр-е

$$|a\rangle + |b\rangle = |a\rangle$$

$$|a\rangle - |a\rangle = |0\rangle$$

$$\alpha \in \mathbb{C}$$

$$\mathbb{I} \cdot |a\rangle = |a\rangle$$

$$(\alpha\beta)|a\rangle = \alpha(\beta|a\rangle)$$

$$\alpha(|a\rangle + |b\rangle) = \alpha|a\rangle + \alpha|b\rangle$$

$$(\alpha + \beta)|a\rangle = \alpha|a\rangle + \beta|a\rangle$$

/8 аксиом лин. пр-ва

а) Чтобы ввести внутреннее произведение:

$$\forall |a\rangle, |b\rangle \in H \quad \langle a|b\rangle \in \mathbb{C}$$

$$1) \langle a, b \rangle = \langle b|a\rangle^*$$

$$2) (\langle a| + \langle b|)|c\rangle = \langle a|c\rangle + \langle b|c\rangle$$

$$3) |\alpha \langle a|b\rangle| = \alpha \cdot \langle a|b\rangle; (\langle a|\alpha|b\rangle) = \overline{\alpha} \langle a|b\rangle$$

$$4) \langle a|a\rangle \geq 0$$

$$\langle a | b \rangle = 0$$

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

Сепарабельное пр-во
условие полноты $\{ |n\rangle \}$

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$$

$$\forall a \in H$$

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

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

$$\psi_a(\beta) = \langle \beta | a \rangle$$

Координатное представление

$$\psi_a(\vec{r}) = \langle \vec{r} | a \rangle$$

$$\{ | \vec{r} \rangle \}$$

$\psi_a(\vec{r})$ - импульсное представление

Энергетическое представление

$$\hat{H} | n \rangle = E_n | n \rangle$$

$$| a \rangle = \sum_n C_n | n \rangle = \sum_n \underbrace{\langle n | a \rangle}_{\text{б. п. к энергетич. представлению}} | n \rangle$$

$$\psi_a(E) = \langle n | a \rangle$$

б. п. к энергетич. представлению

03.04.13.

$$\psi_a(n) = C^{(n)} = \langle n | a \rangle$$

$$| a \rangle^+ = \langle a | \quad \hat{G}^+ = \hat{G} \quad H = \{ | a \rangle \} \leftrightarrow \{ \langle a | \}$$

$$\hat{G} | g \rangle = g | g \rangle \quad g^+ = g$$

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

$$\text{координатная величина} \quad \bar{G} = \langle a | \hat{G} | a \rangle$$

наблюдаемое значение

по теореме, где вектор $| a \rangle$ в H (принадлежит к Гильберту пр-ву) поз. системой собственных.

def оператор проектирования: $\hat{P} [| b \rangle] = | b \rangle \langle b |$

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

проекция



$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad \{|n\rangle\} - \text{базис для рассматриваемой нр-та}$$

иногда нр-та удовлетворяет каноническим нормировкам (есть ортонормированный базис)

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$$

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

$$\text{Sp } G = \sum_n \langle n|\hat{G}|n\rangle$$

$$\hat{G}|a\rangle = |b\rangle$$

$$\sum_n \hat{P}_{[|n\rangle]} = 1 \rightarrow \text{опер. } \hat{P} \text{ канонич. удовлетворяет эт. ука.} \quad \langle n|\hat{G}|n\rangle$$

$$\underline{G = \text{Sp}(\hat{G} \cdot \hat{P}_{[|a\rangle]})^T} \quad \text{Покажем, что это действительно среднее значение } G$$

$$= \sum_n \langle n|\hat{G}\hat{P}_{[|a\rangle]}|n\rangle = \sum_n \langle n|\hat{G}|a\rangle\langle a|n\rangle = \sum_n \underbrace{\langle a|n\rangle}_{\substack{\text{как произвед-е} \\ \text{матриц рефлексии} \\ \text{матрицы}}} \underbrace{\langle n|\hat{G}|a\rangle}_{\substack{\text{как произвед-е} \\ \text{матриц рефлексии} \\ \text{матрицы}}} = \underline{\underline{\langle a|\hat{G}|a\rangle}}$$

пер. р. проецирования
на состояние a

как произвед-е
матриц рефлексии
матрицы

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

def. Суммарное состояние $\{|i\rangle\}$ - базис набор векторов состояния
из всех векторов, принадлежащих к $\mathcal{H}$ -пробу, в котором состояние i можно наблюдать
 $\sum_i \underbrace{W_i}_{\text{вероятности!}} |i\rangle \notin \mathcal{H}$ | бер-ти $W_i > 0$ $\sum_i W_i = 1$.

// Или комбинация чистых состояний - дадут смешанное состояние //

Может состояние, в котором наблюдение нек. б-ра только с бер-то W_i .

Парадигма Эйнштейна, Розена, Подольского

Квантовая телепортация

$$|i_1\rangle, |i_2\rangle, \dots, |i_p\rangle$$

$$W_{i_1}, W_{i_2}, \dots, W_{i_p}$$

$$\sum_{i=1}^p W_i = 1$$

$$\bar{G} = \sum_i w_i \langle \hat{G} \rangle_i \quad \text{среднее значение для оператора } \hat{G}$$

Статистический оператор: $\hat{\rho} = \sum_i |i\rangle w_i \langle i|$ стат. оператор

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

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

$$= \sum_n \sum_i \langle n | i \rangle w_i \langle i | \hat{G} | n \rangle = \sum_i \left(\sum_n \langle n | i \rangle w_i \langle i | \hat{G} | n \rangle \right) = \sum_i w_i \langle i | \hat{G} | i \rangle = \bar{G}$$

$$\bar{G} = \text{Sp} \hat{\rho} \hat{G} \quad \text{среднее значение надматрицы}$$

Об. для стат. оператора:

① Эрмитовость $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$

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

$$\left(\sum_i w_i |i\rangle \langle i| \right)^\dagger = \left(\sum_i w_i \langle i| |i\rangle \right)^* = \sum_i w_i^* |i\rangle \langle i| = \sum_i |i\rangle w_i \langle i|$$

② $\text{Sp} \hat{\rho} = 1$ (нормировка стат. оператора = 1)

$$\left\{ (|i\rangle \langle j|)^\dagger = (|j\rangle^* \langle i|^*)^T = (\langle i|^* |j\rangle^*) = |j\rangle \langle i| \right\}$$

$$\begin{aligned} \text{Sp} \hat{\rho} &= \sum_n \langle n | \sum_i |i\rangle w_i \langle i| | n \rangle = \sum_i \sum_n w_i \langle n | i \rangle \langle i | n \rangle = \sum_i \sum_n w_i \langle i | n \rangle \langle n | i \rangle = \\ &= \sum_i w_i \langle i | i \rangle = \sum_i w_i = 1 \end{aligned}$$

③ $\rho_{nm} = \delta_{nm}$

$$\hat{\rho} = \sum_i |i\rangle \langle i|$$

if нормализованный стат. оператор для исключительно одной системы, он совпадает с оператором проекции

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1, & m = n \\ 0, & m \neq n \end{cases}$$

$$\hat{\rho} = \sum_i w_i |i\rangle \langle i| = |i\rangle \langle i| \quad w_i = 1$$

$$\begin{aligned} \rho_{ij} &= \langle i | \hat{\rho} | j \rangle = \langle i | \sum_k w_k |k\rangle \langle k| | j \rangle = \\ &= \langle i | j \rangle \langle i | i \rangle = \delta_{ij} \end{aligned}$$

4. $\hat{P}^n |a\rangle = \hat{P} |a\rangle$ n - любое число

$$\hat{P}^2 |a\rangle = \sum_j |j\rangle w_j \langle j| \sum_{j'} |j'\rangle w_{j'} \langle j'| = \sum_j w_j w_j |j\rangle \langle j| \langle j| = \sum_j w_j |j\rangle \langle j| = \hat{P} |a\rangle$$

$$\hat{P} |a\rangle = |a\rangle \langle a| a\rangle \langle a| = \hat{P} |a\rangle$$

$\hat{P}^2 \neq \hat{P}$ - это коммутирует с оператором

$\hat{P}^2 = \hat{P}$ - это значит, что оператор является проектором

Найдем уравнение, которому удовлетворяет оператор $\hat{P}$ (тип-е по теореме-Лангара)

тип-е уравнения:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial |j\rangle}{\partial t} = \hat{H} |j\rangle \\ -i\hbar \frac{\partial \langle j|}{\partial t} = \langle j| \hat{H}^\dagger = \langle j| \hat{H} \end{cases}$$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{P}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{P}]$$

08.04.13.

$$\hat{P} = \sum_j |j\rangle w_j \langle j|$$

$$\hat{G} = \text{Sp } \hat{P} \hat{G}$$

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial |j\rangle}{\partial t} = \hat{H} |j\rangle \\ -i\hbar \frac{\partial \langle j|}{\partial t} = \langle j| \hat{H} \end{cases}$$

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H}$$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{P}}{\partial t} = i\hbar \sum_j w_j \left(\frac{\partial |j\rangle}{\partial t} \langle j| + |j\rangle \frac{\partial \langle j|}{\partial t} \right) = \sum_j w_j (\hat{H} |j\rangle \langle j| - |j\rangle \langle j| \hat{H}) =$$

$$= \hat{H} \hat{P} - \hat{P} \hat{H} = [\hat{H}, \hat{P}]$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \hat{P}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{P}]}$$

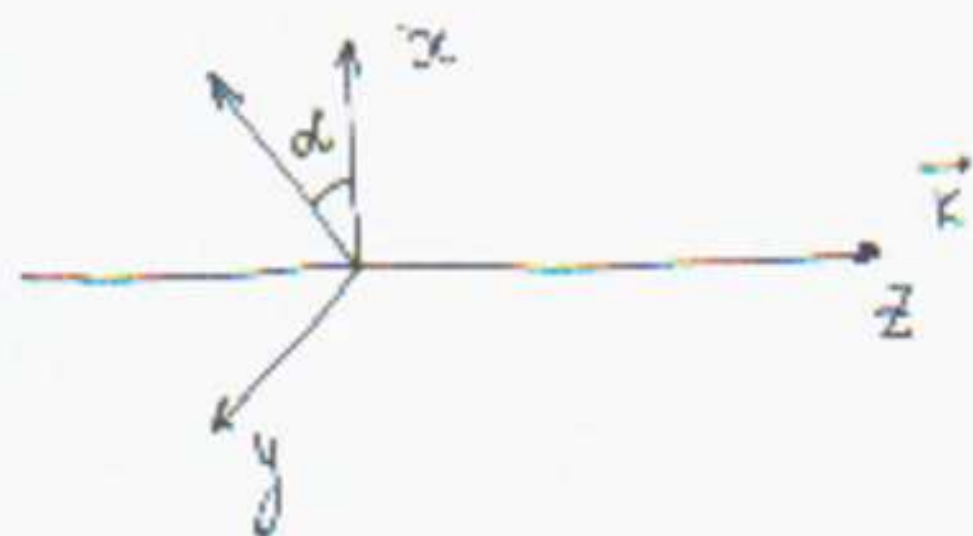
аналог уравнения Шредингера к оператору
Тайзенберга

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = 0 \quad [\hat{H}, \hat{p}] = 0 \quad \hat{p} = \hat{p}(\hat{H})$$

стационарный старт.

оператор г.д. ф.ей замкнутости

$$\hat{p} = \sum_j |j\rangle w_j \langle j| = \sum_j (\textcircled{w_j}) \hat{P}_{[j]} \quad \text{старт оператор}$$



Пусть старт распространяется вдоль оси z

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |0^\circ\rangle \quad \text{оx} \quad \text{поляризация вдоль оси x}$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |90^\circ\rangle \quad \text{oy} \quad \text{поляризация вдоль оси y}$$

$$|a\rangle = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

$$P_{[a]} = |a\rangle \langle a| = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \alpha\alpha^* & \alpha\beta^* \\ \beta\alpha^* & \beta\beta^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2\psi & \cos\psi\sin\psi \\ \cos\psi\sin\psi & \sin^2\psi \end{pmatrix}$$

составляющая поляризации для $|a\rangle$

$$\text{Sp } \hat{P}_{[a]} = 1$$

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

$$\alpha = \cos\psi$$

$$\beta = \sin\psi$$

Пример:

$$\psi = 30^\circ$$

$$\cos 30^\circ = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$\sin 30^\circ = \frac{1}{2}$$

чистая поляризация

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

$$\frac{3}{4}|45^\circ\rangle + \frac{1}{4}|30^\circ\rangle = w_1|j_1\rangle + w_2|j_2\rangle$$

$$\frac{3}{4} + \frac{1}{4} = 1 \quad \sum_j w_j = 1$$

/смешанная поляризация/

Как найти матрицу, соответствующую смешанной поляризации.

$$w_1 P_{[j_1]} + w_2 P_{[j_2]} = \frac{3}{4} P_{[45^\circ]} + \frac{1}{4} P_{[30^\circ]} = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & \frac{\sqrt{3}}{4} \\ \frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{3}{8} + \frac{3}{16} & \frac{3}{8} + \frac{\sqrt{3}}{16} \\ \frac{3}{8} + \frac{\sqrt{3}}{16} & \frac{3}{8} + \frac{1}{16} \end{pmatrix} = \left\{ \begin{array}{l} \text{матрица старт} \\ \text{оператора} \end{array} \right\} = \begin{pmatrix} \frac{9}{16} & \frac{6+\sqrt{3}}{16} \\ \frac{6+\sqrt{3}}{16} & \frac{7}{16} \end{pmatrix}$$

$$\bar{G} = \sum_p \hat{p}_{[a]}$$

Квантово-мех. ансамбль Тиббса

$$E, V, N \quad T, V, N \quad T, V$$

Постулаты Кв-мех. теории:

1. сист. сст. в термодинам. равновесии

$$\bar{G}_a$$

2. a priori априорная равновероятность реализации

3. a priori бер-те макс. эн. реализ. данное макроскоп. сст. с помощью сст. сст. в газ сст. квант. ансам. Тиббса абл. равновероятной.

3. фазы, в кот. нах. сист., абл. случайными - хаотичность фаз

$$[\hat{H}, \hat{\rho}] = 0 \quad \hat{\rho} = \rho(\hat{H}) \quad \hat{\rho}(\hat{H}) = \frac{1}{\Omega(E)} \delta(\hat{I}E - \hat{H})$$

единичный оператор

$$\sum_p \hat{\rho}(\hat{H}) = 1$$

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

Стат. бек - число квант. состояний, которые имеют заданное значение энергии

$$\langle n | \hat{\rho}(\hat{H}) | n \rangle = \rho_{nn} = \frac{1}{\Omega(E)} \delta(E - E_n) \rightarrow \text{диаг. знач. стат. опер-ра}$$

есть плотность бер-те

Поэтому найдем среднее значение $\bar{G} = \sum_p \hat{\rho}(\hat{H}) \hat{G} = \sum_n \frac{1}{\Omega(E)} \delta(E - E_n) \langle n | \hat{G} | n \rangle$

$$\hat{\rho}(\hat{H}) = e^{-\frac{F \cdot \hat{I} - \hat{H}}{\theta}} \quad \rho_{nn} = e^{-\frac{F - E_n}{\theta}} \quad Z = \sum_p e^{-\frac{F \cdot \hat{I} - \hat{H}}{\theta}} = \sum_n \langle n | e^{-\frac{F \cdot \hat{I} - \hat{H}}{\theta}} | n \rangle =$$

$$= \sum_n \left(e^{-\frac{F - E_n}{\theta}} \right) - \text{плотность вероятности}$$

суммируем по кв. сст. с одинак. энергией → это стат. сумма / (не стат.)

$$\rho(x, x') = \langle x | \hat{\rho} | x' \rangle$$

$$F = -\Theta \cdot \ln Z$$

$$\hat{\rho}(\mu) = e^{\frac{\Omega \cdot \hat{I} + \mu \cdot \hat{N} - \hat{H}}{\Theta}}$$

$$Z = \text{Sp} e^{\frac{\mu \hat{N} - \hat{H}}{\Theta}}$$

$$\Omega = -\Theta \cdot \ln Z$$

большая стат. сумма

10.04.13.

квант. анс. Трудса.

$$[E, V, N] \text{ микрокан. анс. } [\hat{H}, \hat{\rho}] = 0 \quad \hat{\rho} = \hat{\rho}(\hat{H})$$

$$(T, V)$$

$$[T, V, N]$$

кол-во квант. со сост-и, имеющих данные значения энергии

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\Omega(E)} \delta(E \cdot \hat{I} - \hat{H}) \quad \text{Sp} \hat{\rho} = 1 \quad \Omega(E) = \text{Sp} \delta(E \cdot \hat{I} - \hat{H}) = \sum_n \delta(E - E_n)$$

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle$$

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

квант. элемент стат. оператор = плотность вер-ти в классике

$$S = k_B \ln \Omega(E)$$

$$\rho = e^{\frac{F \cdot \hat{I} - \hat{H}}{\Theta}}, \quad Z = \sum_n e^{-\frac{E_n}{\Theta}}, \quad Z = \text{Sp} e^{-\frac{\hat{H}}{\Theta}} = \sum_n e^{-\frac{E_n}{\Theta}}, \quad F = -\Theta \ln Z$$

$$\rho_{nn} = e^{\frac{F - E_n}{\Theta}}$$

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

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

большой стат. опер-р

$$\Omega = -\Theta \ln Z \quad \Omega(T, \mu, V)$$

$$\bar{G} = \text{Sp} \hat{\rho} \cdot \hat{G} = \sum_n e^{\frac{F - E_n}{\Theta}} G_{nn}$$

$$\Omega = \int f(p, q) dp dq$$

13.02.13.

$$\frac{dp_i}{dt} = - \frac{\partial H}{\partial q_i} \quad \Omega = H(p, q) \quad \frac{\partial H}{\partial t} = 0 \quad \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial H}{\partial q_i} = \frac{\partial^2 H}{\partial t \partial q_i} = \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial t} = 0$$

$$\{q, p\} \rightarrow a_1, \dots, a_s, T$$

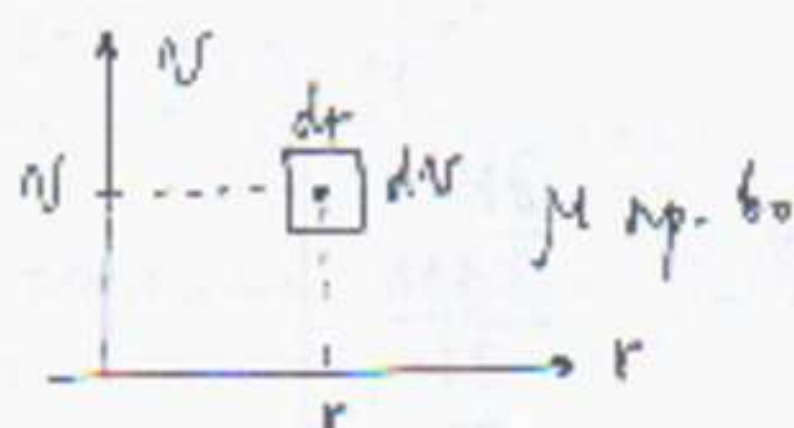
Возникает неопределенность как микросостояние реализует макросостояние

$6N$ уравнений $N \sim 10^{23}$ с заданными $6N$ условиями

$$G(p, q)_{\text{набл.}} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t G(q(q_0, p_0, \tau), p(q_0, p_0, \tau)) d\tau \quad \begin{cases} \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = - \frac{\partial H}{\partial q_i} \end{cases}$$

задано μ пр-во

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



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

число частиц в малом объеме

$f(\vec{v}, \vec{r}, t)$ - функция распределения

$$\frac{f(\vec{v}, \vec{r}, t)}{N} = w(\vec{v}, \vec{r}, t) \quad \text{плотность вер-ти} \quad \int_{\mu} w(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{r} d\vec{v} = 1$$

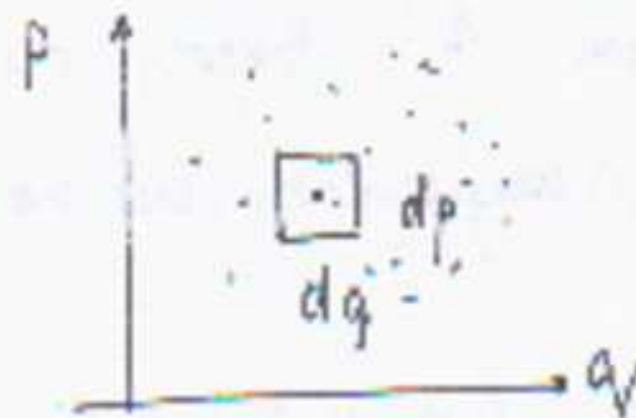
вер. того, что взятая наугад частица в точке μ пр-ва имеет скор. $\vec{v}, \vec{r}$

$$\text{ср. скор. } \vec{v} = \int_{\mu} \vec{v} \cdot w(\vec{v}, \vec{r}, t) d\vec{r} d\vec{v}$$

работает аппарат теории вер-ти

$$\dim \Gamma = 6N = 2n, \quad n = 3N$$

вектор ансамбля Гиббса



в фиксир. моменте вр. t μ изобразит микросостояния (точки), кот. реализуют данное μ макросостояние

с катег. фазовой точкой связан реальную термодинам. систему (от нее абст. отбрасываем) и реализ. данное макросостояние. Эти моменты в ансамбле Гиббса не связанны с ур. др.

$$\rho_{nn} = \rho_0 \delta_{nm} \quad \rho_0 = \text{const} \quad \frac{\partial \rho_{nm}}{\partial t} = 0 \quad [\hat{H}, \hat{\rho}] = 0$$

$$\langle n | [\hat{H}, \hat{\rho}] | m \rangle = \langle n | \hat{H} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{H} | m \rangle = \sum_p \langle n | \hat{H} | p \rangle \langle p | \hat{\rho} | m \rangle - \sum_p \langle n | \hat{\rho} | p \rangle \langle p | \hat{H} | m \rangle = 0$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{умножаем на } \langle n | \\ \text{суммируем по } n \end{array} \right. \sum_p |p\rangle \langle p| = 1 \quad \ominus \sum_p \langle n | \hat{\rho} | p \rangle \langle p | \hat{H} | n \rangle =$$

$$= \sum_p \{ \hat{H}_{np} \rho_0 \delta_{pm} - \rho_0 \delta_{np} \hat{H}_{pm} \} = \rho_0 \hat{H}_{nm} - \rho_0 \hat{H}_{nm} = 0$$

$$\hat{\rho} = \sum_n |n\rangle w_n \langle n| = \left\{ \begin{array}{l} |n\rangle = \sum_m C_n^{(n)} |m\rangle \\ \langle n| = \sum_m (C_m^{(n)})^* \langle m| \end{array} \right\} = \sum_m \sum_n \sum_p w_n C_n^{(p)} (C_m^{(p)})^* \langle m | n \rangle = \sum_m \sum_n \sum_p w_n C_n^{(p)} (C_m^{(p)})^* \delta_{mn} = \sum_m w_m \sum_n \sum_p C_n^{(p)} (C_m^{(p)})^* \delta_{mn}$$

об-ба ортонормированности
 $\langle n | m \rangle = \langle m | n \rangle^*$

$$= \sum_m w_m \sum_n \sum_p C_n^{(p)} (C_m^{(p)})^* \delta_{mn}$$

$$\rho_{nm} = \sum_p C_n^{(p)} (C_m^{(p)})^* \delta_{mn} w_p$$

$$C_n^{(p)} = |C_n^{(p)}| e^{i\psi_n}$$

$$C_m^{(p)*} = |C_m^{(p)}| e^{-i\psi_m}$$

$$e^{i(\psi_n - \psi_m)} \cdot |C_n^{(p)}| |C_m^{(p)}| = \cos(\psi_n - \psi_m) + i \sin(\psi_n - \psi_m)$$

Чтобы это было равно 0, требуется, чтобы

$$\left. \begin{array}{l} \cos(\psi_n - \psi_m) = 0, \quad n \neq m \\ \sin(\psi_n - \psi_m) = 0, \quad n \neq m \end{array} \right\} \text{фазы абс. сдвинуты}$$

$$\hat{\rho} = e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}} = e^{-\beta \hat{H}}, \quad \frac{1}{\theta} = \beta, \quad \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \beta} = -\hat{H} e^{-\beta \hat{H}} = -\hat{H} \hat{\rho} \quad \text{Sp} \hat{\rho} = 1$$

$$\langle x | \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \beta} = -\hat{H} \hat{\rho} \quad |x\rangle \hat{\rho}(0) = \hat{I}$$

уравнение для волновой функции ψ в координатном представлении:

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

Рассмотрим случай, когда имеется своб. частица (одномерная):

$$H_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad \frac{\partial \rho(x, x', \beta)}{\partial \beta} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, x', \beta) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Это напоминает} \\ \text{уравнение дифф. или} \\ \text{теплоты} \end{array} \right.$$

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

Стат. опер-р в коорд. представлении

$$= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m(\Delta x)^2}{2\hbar^2\beta}\right) \rightarrow \text{распределение Гаусса}$$

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

$$\beta = \frac{1}{\theta}$$

величина,
обратная
температуре

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

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

if имеется не одномерная частица (3 мерн. случай)

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

Рассмотрим газ из N частиц, находящихся в об. V , магн. поле $\vec{H}$, $S = \frac{1}{2}$
" газ электронов"

$$\hat{H} = -\mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{H}$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$$

матр. Паули

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

$$\vec{H} \parallel z$$

$$\hat{H} = -\mu_B \sigma_x \cdot H$$

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

$$\rho = \exp\left(\frac{\mu_B \sigma_x \cdot H}{\theta}\right) / Z \quad \text{стат. вес} \quad \text{Sp } \hat{\rho} = 1 \quad Z = \text{Sp } \exp\left(\frac{\mu_B \sigma_x H}{\theta}\right)$$

общая мера меры:

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

$$\int_{\Gamma} dn = n$$

число
этих
систем, находящихся
в ансамбле
Турбса

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

$$dp dq w(p, q, t) = \frac{\rho(p, q, t)}{n} dp dq ; \int_{\Gamma} w(p, q, t) dp dq = 1$$

вероятность того, что данное микросист. находится в заданном макросостоянии

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

- это есть среднее по ансамблю
Турбса.

Нужно показать, что

$$G_{\text{набл}} = \tilde{G} = \bar{G}$$

Макропар. рн (например): энерг. сист. E , нач. t об. V , число сист. N

будем считать плотн. вер. тн как вер. появления события

$(6N-1)$ интеграл функции

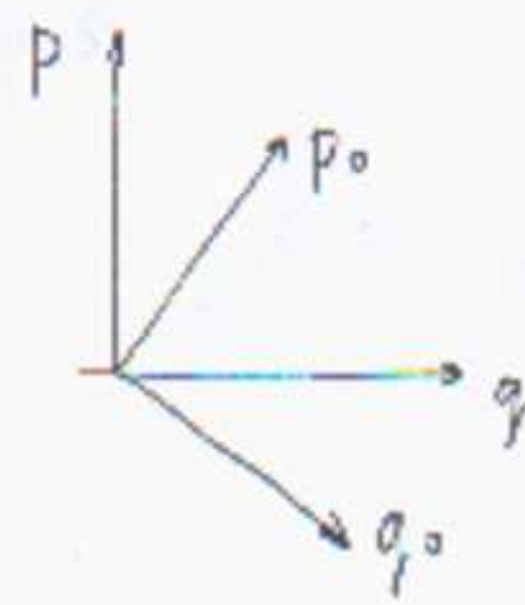
теорема Лиувилля: $\left\{ \begin{array}{l} \text{величина } 6N\text{-мерного фаз. объема, занятого } t \text{ нук.} \\ \text{непрерывной} \\ \text{мом. бр; совокупностью фаз. точек не изменяется} \\ \text{при их движении} \end{array} \right.$

фаз. точки движутся как несжимаемая жидкость

$$t=0 \quad L_0 \quad G_0 = \int_{L_0} dq dp \quad q = \{q_1, \dots, q_{3N}\} \\ p = \{p_1, \dots, p_{3N}\}$$

$$t \quad L_t \quad G_t = \int_{L_t} dq dp$$

теор. Лиув. утверждает, что $G_0 = G_t$



L_0 - область, в котн. находится фаз. кривая

$$G_t = \iint_{L_t} dq dp \quad q = q(p^0, q^0) \quad p = p(p^0, q^0) \quad t \Rightarrow q, p$$

$$G_t = \iint_{L_t} dq dp = \iint_{L_0} \left| \frac{\partial(q, p)}{\partial(p^0, q^0)} \right| dp^0 dq^0$$

Покажем, что экв. движ. от бр. не забывают

$$\mathcal{D}(t) = \frac{\partial(q, p)}{\partial(q^0, p^0)} \quad a_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial x_j^0}$$

$$X = (x_1, \dots, x_{3N}) \quad x_i = q_i \quad x_{3N+i} = p_i$$

$$\frac{d}{dt} \mathcal{D}(t) = \sum_{i,j} \underbrace{\frac{\partial \mathcal{D}}{\partial a_{ij}}}_{\text{аналог гамильтона}} \frac{da_{ij}}{dt} = \sum_{i,j} A_{ij} \frac{da_{ij}}{dt} \quad \frac{da_{ij}}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial x_i}{\partial x_j^0} = \frac{\partial^2 x_i}{\partial t \partial x_j^0} = \frac{\partial^2 x_i}{\partial x_j^0 \partial t} =$$

$$= \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_j^0} = \sum_{s=1}^{3N} \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_s} \cdot \frac{\partial x_s}{\partial x_j^0} = \sum_{s=1}^{3N} \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_s} = a_{sj}$$

$$\frac{d}{dt} \mathcal{D} = \sum_{i,j,s} A_{ij} \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_s} a_{sj} = \sum_{i,s} \left(\sum_j A_{ij} a_{sj} \right) \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_s} = \sum_{i,s} \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_s} \mathcal{D} \cdot \frac{\delta_{is}}{\mathcal{D}} = \sum_i \mathcal{D} \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_i} \quad \textcircled{=}$$

$$\mathcal{D} = \sum_{i=1}^{3N} A_{ij} a_{sj} = \sum_{j=1}^{3N} A_{ij} a_{ij}$$

$$\textcircled{=} \mathcal{D} \cdot \operatorname{div} \dot{X} = \underline{\underline{0}}$$

$$X = (x_1, \dots, x_{3N})$$

$$\dot{X} = (\dot{x}_1, \dots, \dot{x}_{3N}) - \text{скорости}$$

условие непересекаемости:

$$\operatorname{div} \vec{v} = 0 \quad * \quad (\text{интегрируемость})$$

раз. траект. не пересекаются, значит, раз. точки предст. собой движение неспин. жидкости

$$\dot{X} = (\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_{3N}, \dot{p}_1, \dots, \dot{p}_{3N})$$

$$\operatorname{div} \dot{X} = \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right) = \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i} \right) =$$

$$\mathcal{D}(0) = \mathcal{D}(t) = \frac{\partial(q^0, p^0)}{\partial(q^0, p^0)} = 1$$

$$\frac{\partial x_i}{\partial x_j^0} = \delta_{ij}$$

форма бозена может измениться, но сам объем не меняется.

$$x \rightarrow \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \quad w(x_i) > 0 \quad \sum_{i=1}^n w(x_i) = 1 \quad \text{т.о. определена}$$

вероятности

$$x' = \{x_{i_1}, \dots, x_{i_s}\} \quad s < n \quad \text{возьмем подмножество, } x'' = \{x_{t_1}, \dots, x_{t_m}\} \quad m < n$$

$$w(x') = \sum_{p=1}^s w(x_{i_p})$$

$$x' \cap x'' = \emptyset$$

непересекающиеся подмножества

$$w(x' + x'') = w(x') + w(x'') \quad \text{теорема о сложении вероятностей}$$

$$y \rightarrow \{y_1, \dots, y_t\} \quad x_i \quad y_j \quad w(x_i y_j) > 0 \quad \sum_{i,j} w(x_i y_j) = 1$$

вероятности, когда мы наблюдаем две сопр. величины

$$x' = \{x_{i_\ell}, y_{j_m}\} \quad \ell < n \quad m < t$$

$$w(x') = \sum_{\ell=1}^t \sum_{p=1}^m w(x_{i_\ell} y_{j_p})$$

$$w(x' + x'') = w(x') + w(x'') \quad \text{теор. слож. вер. для сопр. ф-ции 2-х переменных}$$

02.13. гусар. раз значения

$$x = \{x_1, \dots, x_n\} \quad y = \{y_1, \dots, y_m\} \quad \underline{w(x_i, y_j) > 0}$$

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m w(x_i, y_j) = 1 \quad w(G) \quad G = G' + G'' \quad G' \cap G'' = \emptyset$$

$$w(G' + G'') = w(G') + w(G'')$$

$$\underline{w_1(x_i)} = \sum_{j=1}^m w(x_i, y_j) \quad w_2(y_j) = \sum_{i=1}^n w(x_i, y_j)$$

усл. вероятности $w_x(y_j) = \frac{w(x_i, y_j)}{w_1(x_i)}$ - как распределена сл. вел. y при фикс. вел. x

$$w_y(x_i) = \frac{w(x_i, y_j)}{w_2(y_j)}$$

будет означать, что сл. вел. x и y независимы, if

$$w(x, y) = w(x) \cdot w(y) \rightarrow x \text{ и } y \text{ статистически независимы}$$

$$w(x) > 0 \quad x \in [x_1, x_2] \quad \text{непрер. интервал}$$

$$x, x+dx \quad \int_{x_1}^{x_2} w(x) dx = 1 \quad \bar{F} = \int_{x_1}^{x_2} F(x) w(x) dx$$

$$\bar{F} = \sum_{i=1}^n F(x_i) w(x_i)$$

Чтобы применить теор. вер. к физ. процессу?

Определение вероятности как частоты появл. событий. (Мизес)

серия n испытаний $n(x)$ - появление события

$$w(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n(x)}{n}$$

$n' \subset n$ n' - подпоследовательность, содержащая n

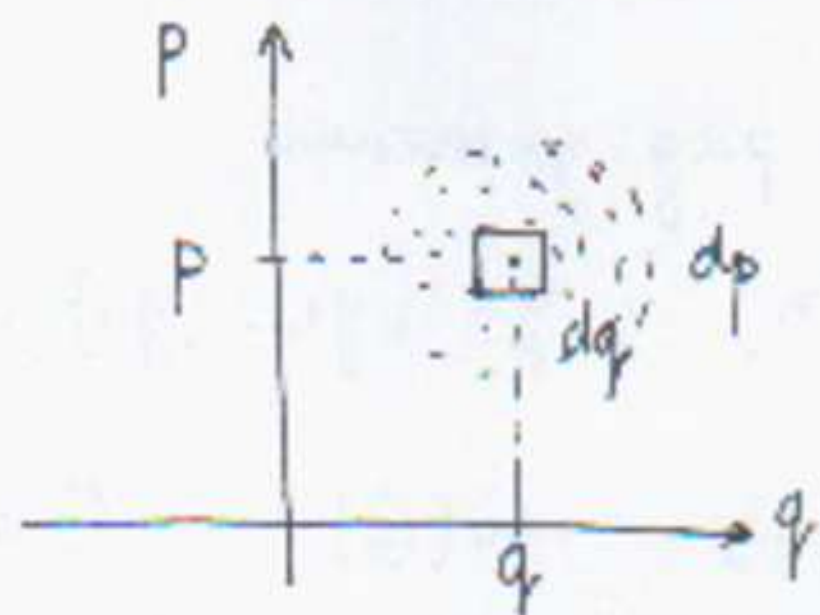
$$n'(x) \subset n(x)$$

$$\forall n' \quad \frac{w'(x_1)}{w'(x_2)} = \frac{w(x_1)}{w(x_2)}$$

$$w'(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n'(x)}{n'}$$

$$\{q, p\} \rightarrow \{a_1, \dots, a_s, T\}$$

dn - число элементов, ком.
неизменяем к э.м
 $6N$ - число ст.св.



$$\dim \Gamma = 6N$$

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

- аналог. теор. беп-м
ф-ция

$$n = \int \rho(p, q) dp dq$$

$$w(p, q) dp dq = \frac{dn}{n} = \frac{\rho(p, q, t)}{n} dp dq$$

$$w(q, p, t) = \frac{\rho(q, p, t)}{n}$$

- норм. беп-м

$$\int w(p, q, t) dp dq = 1$$

$$\overline{G(q, p)} = \int G(p, q) \cdot w(p, q, t) dp dq$$

ср. знач. по ансамблю

уп-е Гамильтона

кажд. фаз. точка глук. по своим параметрам.

$$x_i = q_i; \quad x_{N+i} = p_i$$

$$w(x, t) dx$$

$$t + dt$$

б. замкн. кр.

изменяема на беп.

$$w(x, t) dx = w(x', t + dt) dx'$$

$$dx = dp dq$$

$$dp dq = dp' dq' \quad dx = dx'$$

$$w(x, t) = w(x', t + dt)$$

$$\dot{q}_i = q_i + \dot{q}_i dt$$

$$w(q, p, t) = w(q + \dot{q} dt, p + \dot{p} dt, t + dt)$$

$$\dot{p}_i = p_i + \dot{p}_i dt$$

$$\frac{dw(q, p)}{dt} = \frac{\partial w}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial w}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial w}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = 0$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial w}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial w}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = 0$$

// скобки
- $[H, w]$ Пуассона

$$\frac{\partial w}{\partial t} = [H, w]$$

уп-е
Гамильтона

$$M = \frac{N}{V} \cdot \bar{\mu} \quad \text{ср. магн. момент}$$

$$\bar{\mu} = \mu_B \cdot S_p \int \hat{\sigma}_x = \mu_B \cdot \frac{S_p \exp\left(\frac{\mu_B \cdot \sigma_x \cdot H}{\theta}\right)}{S_p \exp\left(\frac{\mu_B \cdot \sigma_x \cdot H}{\theta}\right)}$$

плотность магн. момента

$$\hat{\sigma}_x = \frac{\exp\left(\frac{\mu_B \cdot \sigma_x \cdot H}{\theta}\right)}{2}$$

$$\hat{\sigma}_x^{2p} = I - \text{ср. напр.}$$

$$\hat{\sigma}_x^{(2p+1)} = \hat{\sigma}_x$$

$$\hat{\sigma}_x \exp\left(\frac{\mu_B \cdot \sigma_x \cdot H}{\theta}\right) = \hat{\sigma}_x \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\mu_B \cdot \sigma_x \cdot H}{\theta}\right)^n$$

15.04.13.

$$\bar{\mu} = \mu_B \cdot \frac{S_p \hat{\sigma}_x \exp\left(\frac{\mu_B \cdot \sigma_x \cdot H}{\theta}\right)}{S_p \exp\left(\frac{\mu_B \cdot \sigma_x \cdot H}{\theta}\right)}; \quad \exp\left(\frac{\mu_B \cdot \sigma_x \cdot H}{\theta}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\mu_B \cdot H}{\theta}\right)^n \hat{\sigma}_x^n \equiv$$

$$\left\{ \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_x^2 = \hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} \equiv \underbrace{\sum_p \frac{1}{(2p)!} \left(\frac{\mu_B \cdot H}{\theta}\right)^{2p} \cdot \hat{I}}_{\text{ch } \frac{\mu_B H}{\theta}} + \underbrace{\sum_p \frac{1}{(2p+1)!} \left(\frac{\mu_B \cdot H}{\theta}\right)^{2p+1} \cdot \hat{\sigma}_x}_{\text{sh } \frac{\mu_B H}{\theta}}$$

$$= \text{ch } \frac{\mu_B \cdot H}{\theta} \hat{I} + \text{sh } \frac{\mu_B \cdot H}{\theta} \cdot \hat{\sigma}_x$$

$$\bar{\mu} = \mu_B \cdot \frac{\text{ch } \frac{\mu_B \cdot H}{\theta} \cdot S_p \hat{\sigma}_x + \text{sh } \frac{\mu_B \cdot H}{\theta} \cdot S_p \hat{I}}{\text{ch } \frac{\mu_B H}{\theta} S_p \hat{I} + \text{sh } \frac{\mu_B H}{\theta} S_p \hat{\sigma}_x} = \mu_B \cdot \text{th } \frac{\mu_B \cdot H}{\theta} \quad \left\| \begin{array}{l} S_p \hat{\sigma}_x = 0 \\ S_p \hat{I} = 2 \end{array} \right\|$$

$$M = n \cdot \bar{\mu} = n \cdot \mu_B \cdot \text{th } \frac{\mu_B \cdot H}{\theta} \rightarrow \text{плотность магн. момента для газа частиц, spins } \text{com. } x = \frac{1}{2}$$

$$\frac{\mu_B H}{\theta} \ll 1$$

$$M = \frac{n \cdot \mu_B^2 \cdot H}{\theta}$$

$$\theta = k_B \cdot T$$

область высоких темп-р

$$S = -k_B \text{Sp} \hat{\rho} \ln \hat{\rho}$$

$\hat{\rho}$ - стат. оператор

энтропия в квантовом случае (ф-ла фон Неймана)

$$S = -k_B \sum_n e^{\frac{F-E_n}{\theta}} \ln e^{\frac{F-E_n}{\theta}} \quad \hat{\rho} = e^{\frac{F \cdot \hat{I} - \hat{H}}{\theta}}, \quad w_n = \rho_{nn} = e^{\frac{F-E_n}{\theta}}$$

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

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\Omega(E)} \delta(E \cdot \hat{I} - \hat{H}) = \frac{1}{\Gamma(E)} \delta(E \cdot \hat{I} - \hat{H}), \quad \text{Sp} \hat{\rho} = 1$$

$$\Gamma(E) \equiv \Omega(E) = \sum_n \delta(E - \underline{E_n}) = \sum_{\{\omega_n\}} \left(\sum_{E_n} \delta(E - E_n) \right) = \sum_{\{\omega_n, E=E_n\}} 1$$

стат. вес

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

/

кв. числа

Квантовые газы

или $S = \frac{2p+1}{2}$ полукласс., газ фермионов

квантовое взаимодействие - обобщенное взаимодействие (если газы в уг. кв. газы).

в зав-ти от числа все кв. частицы раздв. на фермионы и бозоны

У фермионов есть особенность: коорд. вращ. волн. ф. меняет знак при перест-ке двух частиц

У бозонов: в. ф. НЕ меняет знак при перест-ке двух частиц.

Пр-н породоуравнительных частиц.

Наличие обобщенного взаимодей-я приводит к вырождению.

Ф-ции распр. Ферми-Дирака или Бозе-Эйнштейна.

$$S = p$$

$\bar{n}_k \ll 1$ ср. числа заполнения k -го квант.-го сост. $\ll 1$.

эн. газа $E = \sum_k \epsilon_k \cdot \bar{n}_k$ (квант. сост.)

суммируем по всем квант. состояниям энергетического спектра одной молекулы

обменные ~~взаимодействия~~ взаимог-е не играют роли ($\bar{n}_k \ll 1$)

// на k -ом ур-не может находиться только 1 частица/или не находиться вообще //

Больцмановская статистика

Мол. рассматр. как квант. объект - имеет энергет. ур-ни

$$\bar{n}_k = a \cdot e^{-\frac{\epsilon_k}{\theta}} \quad (*)$$

среднее число заполнения (кол-во молекул, находящихся на k -ом квант. уровне)

$\sum_k \bar{n}_k = N$ - сумма по всем квант. состояниям должна давать полное число молекул.

Большое каноническое распредел-е Гиббса:

$$\Omega_k, \quad \Omega = \sum_k \Omega_k \quad W_k = \exp \frac{\Omega_k + \mu \cdot n_k - \epsilon_k \cdot n_k}{\theta} = \exp \frac{\Omega_k + n_k(\mu - \epsilon_k)}{\theta}$$

Большой термодин. пот. Гиббса

$$H_N =$$

if $n_k = 0 \Rightarrow W_0 = \exp \frac{\Omega_0}{\theta} \approx 1$, $W_1 = \exp \frac{\Omega_1 + (\mu - \epsilon_k)}{\theta} \approx e^{\frac{\mu - \epsilon_k}{\theta}}$

вероятность того, что на k -ом кв. ур-не нет ни одной молекулы - ил- 1 молекула на k -ом ур-не

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

$$\bar{n}_k = \sum_{n_k=0}^N W_{n_k} \cdot n_k = 0 \cdot W_0 + 1 \cdot W_1 + \dots = W_1$$

$\bar{n}_k = e^{\frac{\mu - \epsilon_k}{\theta}} \Rightarrow a = \frac{\mu}{\theta}$

распределение Больцмана

Рассмотрим неравновесный иг. Больцмановский газ:

в сост. термодинам. равнов. энтропия достигает max значения

$$S = k_B \ln \Delta \Gamma$$

чтобы получить стат. вес разделим энтер. счетчик молекул на области



в квант. области j имеется $G_j \gg 1$ энергет. уровней,
а кол-во частиц на этих энергет-х уровнях -

$$N_j \gg 1$$

$$\Delta \Gamma = \prod_j \Delta \Gamma_j, \quad S = k_B \sum_j \ln \Delta \Gamma_j$$

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

$$1 \ll N_j \ll G_j$$

мало частиц по сравнению с кол-ом уровней.

стат. вес - это кол-во способов, которыми N_j молекул можно разместить по G_j уровням:

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

$$S = k_B \sum_j \ln \frac{G_j^{N_j}}{N_j!}$$

$$= k_B \sum_j N_j (\ln G_j - \ln e N_j) = k_B \sum_j \frac{N_j}{G_j} (\ln G_j - \ln e N_j) G_j$$

$$= k_B \sum_j G_j \bar{n}_j (\ln \bar{n}_j - 1) \quad (*)$$

$N_j \gg 1 \Rightarrow$ ф-ла Стирлинга
 $\ln N_j! \approx N_j (\ln N_j + 1) = N_j \ln e N_j$

$$1. \quad N = \sum_j N_j, \quad E = \sum_j \epsilon_j N_j, \quad N = \sum_j G_j \bar{n}_j, \quad E = \sum_j G_j \epsilon_j \bar{n}_j \quad (**)$$

надо найти экстремум функционала (*) с двумя гон. усл. (**)!
методом множителей Лагранжа (метод релак. заглав)

$$\delta(S + \alpha N + \beta E) = 0 \quad \delta(S + \alpha N + \beta E) = \sum_j G_j (\ln \bar{n}_j + 1 - 1 + \alpha + \beta \epsilon_j) \delta \bar{n}_j = 0$$

$$\ln \bar{n}_j + \alpha + \beta \epsilon_j = 0 \Rightarrow \boxed{\bar{n}_j = e^{-\alpha - \beta \epsilon_j}} = e^{\frac{\mu - \epsilon_k}{\theta}} \quad \bar{n}_k = e^{\frac{\mu - \epsilon_k}{\theta}}$$

найдем α и β : из распредел. Больцмана: $\alpha = -\frac{\mu}{\theta}$, $\beta = \frac{\epsilon_k}{\theta}$

Или другим способом, через ф-лу Трудса:

$$\boxed{dE = T dS + \mu \cdot dN}$$

$$dS = -\alpha dN - \beta dE \Rightarrow dE = -\frac{1}{\beta} dS - \frac{\alpha}{\beta} dN$$

$$\beta = -\frac{1}{T}, \quad \alpha = -\frac{\mu}{\theta}$$

Мы нашли $\bar{n}_j$ - средние числа заполнения в состоянии термодинам. равновесия.

$\bar{n}_k \sim 1 \rightarrow$ возникают кб. эфф. (одновременное взаимодействие)

$\rightarrow$ переписываем формулу за средн!

17.04.13.

$$S = k_B \sum_j G \bar{n}_j (1 - \ln(\frac{e}{\bar{n}_j})) \quad E = \sum_j G_j \bar{n}_j \cdot \epsilon_j \quad N = \sum_j G_j \bar{n}_j$$

$$\delta(S + \alpha N + \beta E) = 0 \quad \bar{n}_j = e^{\alpha + \beta \epsilon_j} = \exp\left[\frac{\mu - \epsilon_j}{T}\right]$$

$$-\ln \bar{n}_j + \alpha + \beta \epsilon_j = 0 \quad \beta = -\frac{1}{T} \quad \alpha = -\frac{\mu}{T}$$

$$dS + \alpha dN + \beta dE = 0$$

$$dE = T \cdot dS + \mu dN$$

$$F = -\theta \cdot \ln Z = -\theta \cdot \ln \sum_n e^{-\frac{E_n}{\theta}} \quad Z = \sum_n e^{-\frac{E_n}{\theta}}$$

$$e^{-\frac{E_n}{\theta}} = \left(e^{-\frac{\epsilon_k}{\theta}}\right)^N; \quad \sum_n e^{-\frac{E_n}{\theta}} = \left(\sum_k e^{-\frac{\epsilon_k}{\theta}}\right)^N$$

$$\sum_n e^{-\frac{E_n}{\theta}} = \left(\sum_k \exp\left[-\frac{\epsilon_k}{\theta}\right]\right)^N$$

$$\boxed{F = -\theta N \ln \sum_k e^{-\frac{\epsilon_k}{\theta}}}$$

свободная энергия
больцмановского
газа

Если хотим найти свб. эн. Больцмановского газа, то используем канон. преобразование

Квант. эффект - специфическое взаимодействие, при котором в одном и том же состоянии может находиться не более одной частицы

$$\bar{n}_j \sim 1$$

$$g = \frac{2p+1}{2} \quad n_k = 0, 1$$

для $S = p$ (доузны) $n_k = 0, 1, 2, \dots$

Нужно найти среднее число заполнения

$$N = \sum_k n_k; \quad E = \sum_k n_k \epsilon_k$$

$$\Omega_k = -\Theta \cdot \ln \left(\sum_{n_k=0,1} \exp \left[\left(\frac{\mu - \epsilon_k}{\Theta} \right) n_k \right] \right) = -\Theta \cdot \ln (1 + \exp \left[\frac{\mu - \epsilon_k}{\Theta} \right])$$

$$\bar{n}_k = - \left(\frac{\partial \Omega_k}{\partial \mu} \right)_T \quad \bar{n}_k = \Theta \cdot \frac{1}{e^{\frac{\mu - \epsilon_k}{\Theta}} + 1} \cdot e^{\frac{\mu - \epsilon_k}{\Theta}} \cdot \frac{1}{\Theta}$$

$$\bar{n}_k = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_k - \mu}{\Theta}} + 1}$$

распределение Ферми-Дирака

$$\exp \left[\frac{\epsilon_k - \mu}{\Theta} \right] \gg 1$$

Получим распределение Бозе-Эйнштейна для бозонов (через Ω_k)

$$\Omega_k = -\Theta \cdot \ln \sum_{n_k=0}^{\infty} \exp \left[\left(\frac{\mu - \epsilon_k}{\Theta} \right) n_k \right] \quad \text{имеет сумму геом. прогрессии}$$

$$q = \exp \left[\frac{\mu - \epsilon_k}{\Theta} \right] < 1; \quad \epsilon_k = 0 \quad \boxed{\mu < 0} \quad \text{!} \quad \text{св-во для бозе кв. мех. газа}$$

Э конденсация бозе газа

$$\Omega_k = -\Theta \cdot \ln \left[\frac{1}{1 - \exp \left[\frac{\mu - \epsilon_k}{\Theta} \right]} \right] = \Theta \cdot \ln (1 - \exp \left[\frac{\mu - \epsilon_k}{\Theta} \right])$$

$$\bar{n}_k = \Theta \cdot \frac{-1}{1 - \exp[\dots]} e^{\dots} \cdot \frac{1}{\Theta} = e^{\frac{\epsilon_k - \mu}{\Theta}} \gg 1$$

$$\frac{1}{e^{\frac{\epsilon_k - \mu}{\Theta}} - 1} = \bar{n}_k$$

распределение Бозе-Эйнштейна

распределение Бозе-Эйнштейна

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

Это распределение переходит в распредел. Больцмана при $e^{\frac{\epsilon_k - \mu}{\theta}} \gg 1$

$S = k_B \cdot \ln \Delta \Gamma$ - комбинаторное опред. энтропии $\Delta \Gamma = \prod_j \Delta \Gamma_j$

$$\begin{array}{|c|} \hline \epsilon_k \\ \hline j+1 \\ \hline j \\ \hline j-1 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{l} G_j \gg 1 \\ N_j \gg 1 \\ N_j \ll G_j \end{array}$$

В одном и том же состоянии может находиться не более одной частицы.

Число состояний $N_j \leq G_j$, по которому можно распределить N_j частиц по G_j уровням.

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

$$\begin{aligned} S &= k_B \cdot \sum_j (\ln G_j! - \ln N_j! - \ln (-N_j + G_j)!) = k_B \cdot \sum_j [G_j (\ln G_j - 1) - \\ &- N_j (\ln N_j - 1) - (-N_j + G_j) (\ln (-N_j + G_j) - 1)] = k_B \cdot \sum_j G_j [\cancel{\ln G_j} - 1 - \bar{n}_j (\ln N_j - 1) - \\ &- (-\bar{n}_j + 1) (\cancel{\ln G_j} + \ln (-\bar{n}_j + 1) - 1)] = k_B \cdot \sum_j G_j [\cancel{\ln G_j} - 1 - \bar{n}_j \ln N_j + \bar{n}_j + \\ &+ \bar{n}_j (\ln G_j + \ln (-\bar{n}_j + 1) - \cancel{\ln G_j} + \ln (-\bar{n}_j + 1) + 1)] = k_B \cdot \sum_j G_j [-\bar{n}_j \cdot \ln \bar{n}_j + \bar{n}_j \cdot \ln (1 - \bar{n}_j) - \\ &- \bar{n}_j - \ln (1 - \bar{n}_j)] \end{aligned}$$

проверить!

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

Составляем ф. Лагранжа

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

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

$$\ln \frac{1-\bar{n}_j}{\bar{n}_j} + \alpha + \beta \cdot \varepsilon_j = 0$$

$$\frac{1-\bar{n}_j}{\bar{n}_j} = e^{-\alpha - \beta \cdot \varepsilon_j} \quad \alpha = \frac{\mu}{T} \quad \beta = -\frac{1}{T}$$

$$1-\bar{n}_j = \bar{n}_j \cdot e^{\alpha + \beta \cdot \varepsilon_j}$$

$$\boxed{\bar{n}_j = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_j - \mu}{T}} + 1}}$$

для фермионов

о || о о о о || о о о о ↗ расщеп

$$N_j + G_j - 1$$

разрешение расщеп по суммарн → число сочетаний $\Delta \Gamma_j = \frac{(N_j + G_j - 1)!}{(G_j - 1)! N_j!}$

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

$$G_j \gg 1$$

$$\begin{aligned} // \text{используем ф. Стирлинга} // &= k_B \cdot \sum_j [(N_j + G_j)(\ln(N_j + G_j) - 1) - G_j(\ln G_j - 1) - \\ &- N_j(\ln N_j - 1)] = k_B \sum_j G_j [(\bar{n}_j + 1)(\ln G_j + \ln(\bar{n}_j + 1) - 1) - \ln G_j + 1 - \bar{n}_j(\ln N_j - 1)] = \end{aligned}$$

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

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

$$= k_B \sum_j G_j [(1 + \bar{n}_j) \ln(1 + \bar{n}_j) - \bar{n}_j \ln \bar{n}_j] \quad \parallel N = \sum_j G_j \cdot \bar{n}_j, E = \sum_j G_j \cdot \bar{n}_j \cdot \epsilon_j \parallel$$

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

$$\ln \frac{1 + \bar{n}_j}{\bar{n}_j} + \frac{\alpha + \beta \epsilon_j}{k_B} = 0 \quad \frac{1 + \bar{n}_j}{\bar{n}_j} = e^{-\frac{\alpha + \beta \epsilon_j}{k_B}}, \quad \bar{n}_j = \frac{e^{-\frac{\alpha + \beta \epsilon_j}{k_B}}}{1 - e^{-\frac{\alpha + \beta \epsilon_j}{k_B}}} = \frac{1}{e^{\frac{\alpha + \beta \epsilon_j}{k_B}} - 1}$$

$$\boxed{\bar{n}_j = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_j - \mu}{\theta}} - 1}}$$

$$\alpha = -\frac{\mu}{T}, \quad \beta = \frac{1}{T}$$

$$e^{\frac{\epsilon - \mu}{\theta}} \gg 1$$

абсолютно Бозе-конденсат

Ферми и Бозе газы расмус

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

"+" - Ферми, "-" - Бозе

$\epsilon = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$ - энергия частицы в зависимости от координат

$$\text{число квантов состояний } \bar{n} \cdot g \cdot \frac{dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z \cdot dV}{(2\pi\hbar)^3} = dN \quad g = 2S + 1$$

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

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

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

число состояний, соответствующих энергии ϵ и энергии $\epsilon + d\epsilon$

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

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

$\epsilon, \epsilon + d\epsilon$

$$dN_\epsilon = \frac{g \cdot V \cdot m^{3/2} \sqrt{\epsilon} \cdot d\epsilon}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3 \left(e^{\frac{\epsilon - \mu}{\theta}} \pm 1 \right)}$$

$$\frac{\epsilon}{\theta} = z$$

$$N = \frac{g V m^{3/2}}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{\theta}} \pm 1} d\epsilon$$

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

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

$$\Omega = \sum_k \Omega_k = \mp \theta \cdot \sum_k \ln(1 \pm e^{\frac{\mu - \epsilon_k}{\theta}}) = \mp \frac{g \cdot V \cdot m^{3/2}}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} \cdot \theta \cdot \int_0^\infty \sqrt{\epsilon} \cdot \ln(1 \pm e^{\frac{\mu - \epsilon}{\theta}}) d\epsilon =$$

$$= \mp \frac{g \cdot V \cdot m^{3/2} \theta}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} \left(\frac{2}{3} \cdot \epsilon^{3/2} \ln(1 \pm e^{\frac{\mu - \epsilon}{\theta}}) \Big|_0^\infty - \frac{2}{3} \int_0^\infty \epsilon^{3/2} \cdot \frac{e^{\frac{\mu - \epsilon}{\theta}}}{1 \pm e^{\frac{\mu - \epsilon}{\theta}}} \cdot \frac{1}{\theta} d\epsilon \right) =$$

$$= -\frac{2}{3} \left[\frac{g \cdot V \cdot m^{3/2}}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} \int d\epsilon \cdot \frac{\epsilon^{3/2}}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{\theta}} \pm 1} \right] = -\frac{2}{3} E$$

$$\Omega = -pV = -\frac{2}{3} E \quad \boxed{pV = \frac{2}{3} E}$$

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

$$E = \frac{3}{2} N k_B \cdot T \quad ; pV = N k_B \cdot T$$

Убедимся, что ур-е адиабаты для газа Ферми и Бозе имеют один и тот же вид, как ур-е адиабаты иго. газа.

$$\Omega = -p \cdot V = -\frac{2}{3} \frac{V (m\theta)^{3/2} \theta}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{z^{3/2} dz}{e^{z - \frac{\mu}{\theta}} \pm 1} \quad \text{это есть обозначение } \frac{5}{2}$$

$$\Omega(\mu, \theta) = \mathcal{L}^{\frac{5}{2}} \Omega(\mu, \theta) \quad \mu, \theta \sim \frac{5}{2}$$

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

→ $\frac{S}{N} = \gamma \left(\frac{\mu}{T} \right)$

$$\frac{S}{N} = \gamma \left(\frac{M}{T} \right) \quad S = \text{const} \quad \frac{M}{T} = \text{const}$$

$$\frac{P}{T^{5/2}} = \text{const} \quad P \cdot T^{-5/2} = \text{const} \quad \frac{S}{V} = \Theta^{3/2} \cdot f \left(\frac{M}{\Theta} \right) \quad V \sim \frac{1}{T^{3/2}}$$

$$\boxed{P \cdot V^{5/3} = \text{const}} \quad \gamma = \frac{5}{3}$$

адиабата роза элемент-а расмус коллаг. с адиабатами уг. роза
Однако в этом случае $\gamma \neq \frac{C_p}{C_v}$.

$$\begin{aligned} \frac{e^{\frac{M}{\Theta}} \ll 1}{P} &= \frac{2}{3} \frac{(m\Theta)^{3/2} \Theta}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{z^{3/2} e^{\frac{M}{\Theta} - z} dz}{1 \pm e^{\frac{M}{\Theta} - z}} = \\ &= \frac{2}{3} \frac{(m\Theta)^{3/2} \Theta}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty z^{3/2} e^{\frac{M}{\Theta} - z} (1 \mp e^{\frac{M}{\Theta} - z}) dz \stackrel{(*)}{=} \frac{2}{3} \frac{(m\Theta)^{3/2} \Theta}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} [e^{\frac{M}{\Theta}} \Gamma(\frac{5}{2}) \mp e^{\frac{M}{\Theta}} \cdot \\ &\cdot \frac{1}{2^{5/2}} \Gamma(\frac{5}{2})] = \frac{2}{3} \frac{(m\Theta)^{3/2} \Theta \cdot \sqrt{\pi}}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} e^{\frac{M}{\Theta}} \left(1 \mp \frac{e^{\frac{M}{\Theta}}}{2^{5/2}} \right) \end{aligned}$$

$$\textcircled{*} \rightarrow \left\{ \int_0^\infty z^{3/2} e^{-z} dz = 2^{-5/2} \int_0^\infty t^{5/2} e^{-t} dt = 2^{-5/2} \Gamma(\frac{5}{2}) \right.$$

24.04.13.

$$\exp \left[\frac{\epsilon - M}{\Theta} \right] \gg 1 \quad \exp \left[\frac{M - \epsilon}{\Theta} \right] \ll 1 \quad \Omega_\Delta = -pV = -g \frac{V (m\Theta)^{3/2} \Theta}{(2\pi)^{3/2} \hbar^3} e^{\frac{M}{\Theta}} \cdot$$

$$\cdot \left(1 \mp \frac{1}{2^{5/2}} e^{\frac{M}{\Theta}} \right)$$

$$N = \frac{g \cdot V (m\Theta)^{3/2}}{(2\pi)^{3/2} \hbar^3} \int_0^\infty z^{1/2} e^{\frac{M}{\Theta} - z} dz = \frac{g \cdot N \cdot (m\Theta)^{3/2}}{(2\pi)^{3/2} \hbar^3} e^{\frac{M}{\Theta}} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2} \dots$$

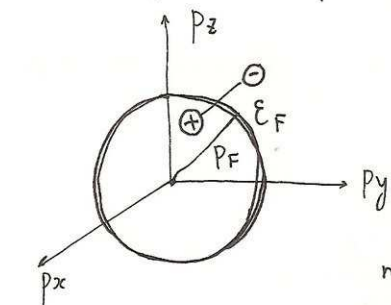
$$P \cdot V = N \Theta \left(1 \pm \frac{\pi^{3/2}}{2g} \cdot \frac{N \cdot \hbar^3}{V (m\Theta)^{3/2}} \right) \quad PV = \frac{2}{3} E$$

Рассмотрим случай, когда полностью вырождены газ электронов.

Для электронов:

$$S = \frac{1}{2}; g = 2S + 1 = 2 - \text{вырождение}$$

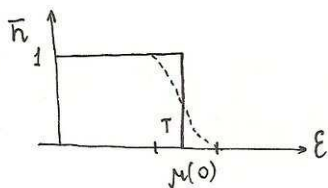
N электронов при $T=0$ занимает в наст. пр-ке объем Ферми (объем, огранич. поверхностью Ферми)



сфера Ферми

$$\bar{n} = \frac{1}{\exp\left[\frac{\epsilon - \mu}{T}\right] + 1} \Rightarrow \begin{cases} 1, & \epsilon < \mu(0) \\ 0, & \epsilon \gg \mu(0) \end{cases}$$

при $T=0$ распределение Ферми-Дирака переходит в ступенку Ферми



→ размытие фермиевской ступеньки
ширина размытия порядка T

$$\epsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} \quad p, p+dp \quad g \cdot \frac{V \cdot 4\pi \cdot p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} - \text{число квантовых состояний в интервале } p, p+dp$$

Энергия поступ-во движения:

$$\epsilon = \frac{p^2}{2m} - \text{эн. электронов} \quad N = \int_0^{p_F} g \cdot V \cdot \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = \int_0^{p_F} \frac{V \cdot p^2 dp}{\pi^2 \hbar^3} = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} \cdot \frac{p_F^3}{3}$$

$$p_F = \left(\frac{N}{V} \cdot 3\pi^2 \hbar^3 \right)^{1/3} = \hbar \cdot \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3} \quad d\epsilon = \epsilon \cdot \frac{V \cdot p^2 dp}{\pi^2 \hbar^3} = \frac{V \cdot p^4 dp}{2m \cdot \pi^2 \hbar^3}$$

$$\epsilon = \epsilon \cdot \frac{V \cdot p^2 dp}{\pi^2 \hbar^3} = \frac{V \cdot p^4 dp}{2m \pi^2 \hbar^3} \quad E = \frac{V}{2\pi^2 \hbar^3 \cdot m} \int_0^{p_F} p^4 dp = \frac{V p_F^5}{10 \pi^2 \hbar^3 \cdot m}$$

$$E = \frac{V}{10 \pi^2 \hbar^3 \cdot m} \cdot \hbar^5 \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{5/3} = \frac{\hbar^2}{10 \pi^2 \cdot m} \left(3\pi^2 N \right)^{5/3} V^{-2/3}$$

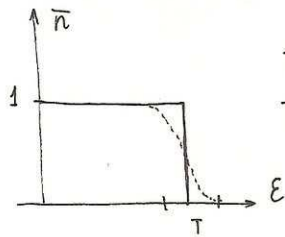
$$p = - \frac{\partial E}{\partial V} = \frac{2}{30} \cdot \frac{\hbar^2}{\pi^2 \cdot m} \cdot \left(3\pi^2 N \right)^{5/3} \cdot V^{-5/3} \neq 0 \quad p_F \sim \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3}$$

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2 \cdot \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3}}{2m} = k_B \cdot T_F \quad \text{полностью вырожден газ } \epsilon \text{ при } T=0$$

$$T_F = \frac{\hbar^2 \cdot \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3}}{2 \cdot m \cdot k_B} \sim 10^4 \div 10^5 \text{ K} \quad \Theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B} - \text{температура Дебая}$$

$\mu(0) = \epsilon_F = k_B \cdot T_F$ $T < T_F$ - распределение Ферми-Дирака (63)
 $T \gg T_F$ - ступенька размывается (те будет разпр. П-Д)

различные Фермиевской структуры прояв. в от. узкой области



$$T < T_F$$

$$T \gg T_F$$

На пов-ти сферы появляется $\bar{e}$, а в
сфере появл. зарядка $\oplus$

Это будет слабо неидеальный газ

$$\frac{ze^2}{a} \ll \epsilon_F$$

вырожденный

чем более плотный атом. газ $\bar{e}$, тем более
он атом. вырожденный (идеальный)

Энергия кин. взаимог-я $\bar{e}$ с зар. ядра

$$a = \sqrt[3]{\frac{V}{N}}, \quad ze^2 \cdot \left(\frac{N}{V}\right)^{1/3} \ll \frac{\hbar^2 (3\pi^2 \cdot \frac{N}{V})^{2/3}}{2m}, \quad \frac{N}{V} \gg \left(\frac{ze^2 \cdot 2m}{\hbar^2 (3\pi^2)^{2/3}}\right)^3$$

Для классич. газа наоборот, тем более он атом. разреженный
тем более он атом. идеальный.

$$\Omega = -\frac{2}{3} \cdot \frac{g \cdot V \cdot m^{2/3}}{2^{1/2} \cdot \pi^2 \cdot \hbar^3} \cdot \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2} \cdot d\epsilon}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{\theta}} + 1}$$

$$I = \int_0^\infty \frac{f(\epsilon) d\epsilon}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{\theta}} + 1} = \int_0^\mu f(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} f'(\mu) \cdot T^2 + \frac{7\pi^4}{360} \theta^4 \cdot f'''(\mu) + \dots$$

$$\int_0^\infty \frac{z^{x-1}}{e^z + 1} = \Gamma(x) (1 - 2^{1-x}) \cdot \zeta(x)$$

$$f(\epsilon) = \epsilon^{3/2}, \quad f'(\epsilon) = \frac{3}{2} \epsilon^{1/2}$$

гипотеза-ф.з. Джумана

$$\Omega = -\frac{2}{3} \cdot \frac{g \cdot V \cdot m^{2/3}}{2^{1/2} \cdot \pi^2 \cdot \hbar^3} \cdot \left(\int_0^\mu \epsilon^{3/2} d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} \theta^2 \cdot \frac{3}{2} \mu^{1/2} + \dots \right) = -\frac{2}{3} g \cdot \frac{V \cdot m^{2/3}}{2^{1/2} \cdot \pi^2 \cdot \hbar^3} \left(\frac{2}{5} \mu^{5/2} + \frac{\pi^2}{4} \theta^2 \mu^{1/2} \right)$$

$$= \Omega_0 - \left(\frac{\frac{1}{6} g V m^{3/2} \theta^2 \cdot \mu^{1/2}}{2^{1/2} \cdot \pi^2 \cdot \hbar^3} \right) \text{ — добавка к основной термодинам. потенциалу}$$

дополной термодинам.
потенциал при $\theta = 0$

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

$$F = F(N, T, V) = F_0 - \underbrace{\left(\frac{g \cdot \pi^{2/3}}{6} \right) \cdot \frac{m}{\hbar^2} \cdot N \cdot \Theta^2 \left(\frac{V}{N} \right)^{2/3}}_{\beta}, \quad S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V, N} =$$

$$= 2 \cdot \left(\frac{g \pi}{6} \right)^{2/3} \cdot \frac{m}{\hbar^2} \cdot N \cdot \Theta \cdot \left(\frac{V}{N} \right)^{2/3} \cdot k_B$$

29.04.13.

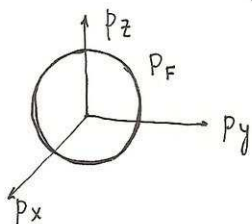
$$C_V = \underbrace{\left(\frac{g \pi}{6} \right)^{2/3} \cdot \frac{m}{\hbar^2}}_{\beta} \cdot N \cdot \Theta \cdot \left(\frac{V}{N} \right)^{2/3} = \beta \cdot N \cdot \Theta \cdot \left(\frac{V}{N} \right)^{2/3} \sim T$$

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V, \quad E = \int_0^T C_V dT = \frac{\beta}{2} \cdot k_B \cdot T^2 \cdot N \cdot \left(\frac{V}{N} \right)^{2/3} + E(0)$$

Термодинам. сб-ва ультрарелятив. газа $\bar{e}$ -ов
Рассмотрим вырожденный ультрарелятив. и газ электронов.

$$\mathcal{E} = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} \quad \underline{\mathcal{E} \gg m c^2} \quad \mathcal{E} \approx p \cdot c \quad \left| \begin{array}{l} \text{Энергия минимальна} \\ \text{но импульс} \end{array} \right|$$

поверхность Ферми



$$T=0 \quad p_F = (3\pi^2)^{1/3} \cdot \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3} \cdot \hbar$$

$$\mathcal{E}_F = \mu(0) = c \cdot p_F = (3\pi^2)^{1/3} \cdot c \cdot \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3} \cdot \hbar$$

$$p, p+dp$$

$$dN_p = \frac{2 \cdot 4\pi \cdot V \cdot p^2 \cdot dp}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V \cdot p^2 \cdot dp}{\pi^2 \cdot \hbar^3}$$

$$E = V \int_0^{p_F} p \cdot c \cdot \frac{p^2 \cdot dp}{\pi^2 \cdot \hbar^3} = \frac{cV}{4\pi^2 \cdot \hbar^3} \cdot p_F^4 = \frac{(3\pi^2)^{4/3} V}{4\pi^2 \cdot \hbar^3} \cdot \left(\frac{N}{V} \right)^{4/3} \cdot \hbar^4$$

$$p = - \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_N = + \frac{(3\pi^2)^{4/3} \cdot N^{4/3}}{4\pi^2 \cdot 3 \cdot V^{4/3}} \cdot \frac{V}{V} = + \frac{1}{3} \frac{E}{V}$$

$$p \sim \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3}$$

$$\boxed{p \cdot V = \frac{1}{3} \cdot E}$$

где ∂ - оператор газа $\bar{e}$:

$$\boxed{p \cdot V = \frac{2}{3} \cdot E}$$

$$\boxed{\mathcal{E} = \frac{p^2}{2m}} - \text{Энергия кинетическая} \\ \text{но кин-м}$$

$$\Omega = - \frac{T \cdot V \cdot k_B}{\pi^2 \cdot c^3 \cdot \hbar^3} \cdot \int_0^\infty \varepsilon^2 \ln(1 + e^{\frac{\mu - \varepsilon}{\theta}}) d\varepsilon = - \frac{T \cdot V \cdot k_B}{\pi^2 \cdot c^3 \cdot \hbar^3} \cdot \left[\frac{\varepsilon^3}{3} \cdot \ln(1 + e^{\frac{\mu - \varepsilon}{\theta}}) \right]_0^\infty -$$

$$- \frac{1}{\theta^3} \int \frac{\varepsilon^3}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{\theta}} + 1} d\varepsilon \Big] = - \frac{V}{3\pi^2 \cdot c^3 \cdot \hbar^3} \cdot \int_0^\infty \frac{\varepsilon^3}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{\theta}} + 1} d\varepsilon = - \frac{1}{3} E = - p \cdot V$$

$$\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon$$

$$dN_\varepsilon = \frac{V \cdot \varepsilon^3 d\varepsilon}{\pi^2 \cdot \hbar^3 \cdot c^3 \cdot (e^{\frac{\varepsilon - \mu}{\theta}} + 1)}$$

$$dE = \varepsilon \cdot dN_\varepsilon$$

$$z = \frac{\varepsilon}{\theta} \quad \Omega = - \frac{V}{3\pi^2 \cdot c^3 \cdot \hbar^3} \cdot \int_0^\infty \frac{z^3 dz}{e^{z - \frac{\mu}{\theta}} + 1} \sim \theta^4 \int_0^\infty \frac{z^3 \cdot dz}{e^{z - \frac{\mu}{\theta}} + 1}$$

термодинам. пот. Давда - оговор. 4-го пор. ка отнес. к θ, μ

$$S = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_V - \text{огор. 3-го пор. отнес. } \theta, \mu$$

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_T - \text{нн}$$

$$\frac{S}{N} \sim \gamma \left(\frac{\mu}{\theta} \right)$$

$$(S = \text{const}) \quad \text{адиабатич. процесс} \Rightarrow \frac{\mu}{\theta} = \text{const}$$

$$\frac{p \cdot V}{\theta^4} = \text{const} \quad \frac{N}{V} \sim \theta^3, \quad V \sim \frac{1}{\theta^3}$$

$$VT^3 = \text{const} \quad \frac{T^4}{p} = \text{const}$$

$$pV^{7/3} = \text{const}$$

$$\gamma = \frac{7}{3}$$

адиабата
Дуассона

(показатель адиабаты
не связан с числом степеней свободы)

термодинам. об-та
вырожденного Фозе-газа

$$\text{при } T=0 \quad \varepsilon=0 \quad E=0 \quad \text{газ Фозе расщепл}$$

$$\text{при } T \neq 0 \quad \frac{N}{V} = \frac{g(m\theta)^{3/2}}{2^{1/2} \pi^2 \cdot \hbar^3} \cdot \int_0^\infty \frac{\sqrt{z} \cdot dz}{e^{z - \frac{\mu}{\theta}} - 1} \quad \text{плотность числа частиц}$$

(*)

$$\frac{N}{V} = \text{const} \quad \text{дугде нормирана мери-пу } T$$

гдѣ Бозе-распределение $\boxed{\mu < 0}$, $\mu = \mu(T) \rightarrow$ хим. потенциал возрастает (но может уменьшаться)

$$\frac{N}{V} = \frac{g(m \cdot k_B \cdot T_0)^{3/2}}{2^{1/2} \cdot \pi^2 \cdot \hbar^3} \cdot \int_0^\infty \frac{\sqrt{z} dz}{e^z - 1} = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \zeta\left(\frac{3}{2}\right)$$

$$T_0 = \left(\frac{2^{1/2} \cdot \pi^2 \cdot \hbar^3 \cdot (N/V)}{g(m \cdot k_B)^{3/2} \cdot \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \cdot \zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \right)^{2/3} \approx \frac{3,31}{g^{2/3}} \cdot \frac{\hbar^2}{m} \cdot \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3}$$

$\mu(T_0) = 0$

$$\int_0^\infty \frac{z^{x-1}}{e^z - 1} dz = \Gamma(x) \cdot \zeta(x)$$

$$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 2,612...$$

при $T < T_0$ ур-е (*) не имеет отрицательных решений для μ !

$$N = \sum_k \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_k - \mu}{T}} - 1} \Rightarrow \frac{N}{V} = \frac{g \cdot m^{3/2}}{2^{1/2} \cdot \pi^2 \cdot \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon} d\epsilon}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{T}} - 1}$$

$$\boxed{\mu(T_0) = 0}$$

нижний предел $\epsilon_k = 0$

$$N = \frac{V g(m \cdot \Theta)^{3/2}}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} \cdot \int_0^\infty \frac{\sqrt{z} dz}{e^z - 1} \quad \ominus$$

можно воспользоваться этой формулой только для $\underline{\epsilon > 0}$

$$\ominus N\left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} \rightarrow \text{число конденсированных частиц}$$

число частиц, кот. имеют энергию $= 0$

$$\boxed{N_{\epsilon=0} = N - N_{\epsilon>0} = N \left(1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}\right)}$$

При темп-ре $T < T_0$ происходит явление Бозе-конденсации

При $T = 0$ все частицы переходят в Бозе-конденсат

$$E = \frac{V g(m \cdot \Theta)^{3/2}}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} \cdot \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2} d\epsilon}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{T}} - 1} = \frac{V \cdot g(m \cdot \Theta)^{3/2}}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} \cdot \int_0^\infty \frac{z^{5/2} dz}{e^z - 1}$$

$\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = -\frac{3\sqrt{\pi}}{4}$
 $\zeta\left(\frac{5}{2}\right) = 1,644$
 гдѣ $\rho = \dots$
 Дирака

$$\Rightarrow E = 0,77 N \cdot k_B \cdot T \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}$$

$$E = 0,128 g \cdot \frac{m^{3/2} \cdot T^{5/2}}{\hbar^3} \cdot V$$

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \frac{5}{2} \cdot \frac{E}{T}$$

$$T \cdot C_V = dS$$

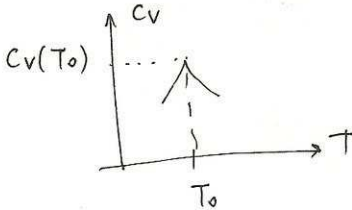
$$S = \int \frac{C_V}{T} \cdot dT$$

$$S = \frac{5}{2} \frac{E}{T}$$

$$F = E - T \cdot S = -\frac{2}{5} E; \quad F = G - p \cdot V = \mu \cdot N + \Omega \Big|_{\mu=0} = \Omega$$

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = \frac{2}{5} \cdot 0,128 \text{ g} \cdot \frac{m^{3/2} \cdot T^{5/2}}{h^3} \Rightarrow p \neq p(V) \quad \boxed{p \sim T^{5/2}}$$

$$\left(\frac{\partial C_V}{\partial T} \right)_{T=T_0}$$



узнаем

$$C_V(T_0) = 1,28 \cdot \frac{3}{2} N$$

08.05.13.

Упрощенное уравнение

V, T

$$F \quad \mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{V,T} = 0 \quad dF = -SdT - p dV + \mu \cdot dN$$

$$\boxed{\mu = 0}$$

$$\bar{n}_k = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1}$$

$\omega, \omega + d\omega$

$$\omega = k \cdot c$$

$$2 \cdot \frac{d\vec{k} \cdot V}{(2\pi)^3}$$

$k, k + dk$

$$\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\frac{8\pi \cdot k^2 \cdot dk \cdot V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1} = dN_k$$

$\omega, \omega + d\omega$

$$dN_\omega = \frac{1}{\pi^2 \cdot c^3} \cdot \frac{V \cdot \omega^2 \cdot d\omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1}$$

$$\boxed{dE_\omega = \frac{V \cdot \hbar \cdot \omega^3 \cdot d\omega}{\pi^2 \cdot c^3 \cdot (e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1)}}$$

q-19
Планка

$$E = \hbar \omega$$

где $\hbar$ — постоянная Планка, ω — угловая частота

$$dE_\epsilon = \frac{\hbar \cdot V \cdot \omega^3 \cdot d\omega}{\pi^2 \cdot c^3 \cdot (e^{\frac{\epsilon}{\theta}} - 1)} = \frac{\hbar V \cdot \epsilon^3 \cdot d\epsilon}{\pi^2 \cdot \hbar^3 \cdot c^3 \cdot (e^{\frac{\epsilon}{\theta}} - 1)}$$

$$K = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{1}{x}$$

$$\omega = K \cdot c$$

$$dE_\lambda = - \frac{\hbar V \cdot d\lambda}{\pi^2 \cdot c^3 \cdot \lambda^5 \cdot (e^{\frac{\hbar c}{\lambda \theta}} - 1)}$$

$$\underline{k_B \cdot T \gg \hbar \cdot \omega} \quad \bar{n}_K = \left(\frac{\hbar \omega}{k_B \cdot T} \right)^{-1} = \frac{k_B \cdot T}{\hbar \cdot \omega} \quad \text{пары-е Пенет-Дирака}$$

$$dE_\omega = \frac{V \cdot \omega^3 \cdot d\omega \cdot k_B \cdot T}{\hbar \omega \cdot \pi^2 \cdot c^3} = \frac{V \cdot k_B \cdot T \cdot \omega^2 \cdot d\omega}{\pi^2 \cdot c^3 \cdot \hbar}$$

$$\boxed{dE_\epsilon = \frac{V \cdot k_B \cdot T \cdot \omega^2 \cdot d\omega}{\pi^2 \cdot c^3}}$$

q-1a gno crump. hуmоmоm

$$k_B \cdot T \ll \hbar \omega$$

$$\bar{n}_K = e^{-\frac{\hbar \omega}{\theta}}$$

$$\boxed{dE_\epsilon = \frac{V \cdot e^{-\frac{\hbar \omega}{\theta}} \cdot \epsilon^3 d\epsilon}{\hbar \cdot c^3}}$$

q-1a Duna

$$\frac{\hbar \omega}{\theta} = x$$

$$dE_\epsilon = \frac{V \cdot \theta^4 \cdot x^3 \cdot dx}{\pi^2 \cdot c^3 \cdot \hbar^2 (e^x - 1)}$$

$$\frac{x^3}{e^x - 1}$$

$$x_{\max} = 2,822$$

$$\frac{\hbar \omega_{\max}}{k_B \cdot T} = 2,822$$

$$15.05 - u/p.$$

$$\Omega = F - \mu \cdot N = F \quad \Omega = \theta \sum_K \ln(1 - e^{\frac{\mu - \epsilon_K}{\theta}})$$

$$F = \theta \cdot \sum_K \ln(1 - e^{-\frac{\epsilon_K}{\theta}}) = \theta V \int \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \ln(1 - e^{-\frac{\hbar \omega}{\theta}}) d\omega =$$

$$= \theta \cdot \left(\frac{\theta}{\hbar} \right)^3 \cdot \frac{V}{\pi^2 \cdot c^3} \cdot \left(\int_0^\infty x^2 \ln(1 - e^{-\frac{\hbar \omega}{\theta}}) dx - \frac{1}{3} \int_0^\infty x^3 \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} dx \right) = -\theta \cdot \left(\frac{\theta}{\hbar} \right)^3 \cdot \frac{1}{\pi^2 \cdot c^3} \cdot \frac{1}{3} V \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

= \Gamma(4) \cdot \zeta(4) = \frac{\pi^4}{15}

$$= - \frac{V \cdot \pi^2 \cdot \theta^4}{45 \cdot (\hbar \cdot c)^3} = - V \cdot \theta^4 \cdot \frac{46}{3c}$$

$$\sigma = \frac{\pi^2 \cdot k_B^4}{60 \hbar^3 \cdot c^2} \approx 5,67 \cdot 10^{-5} \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}^4}$$

ном. Стефана-Больцмана

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = \frac{16}{3} \cdot \frac{\sigma}{c} \cdot V \cdot T^3$$

$$C_V = T \cdot \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = 16 \cdot \frac{\sigma}{c} \cdot V \cdot T^3$$

$$E = F + T \cdot S = - V \cdot T^4 \cdot \frac{46}{3c} + \frac{16\sigma}{3c} \cdot V \cdot T^4 =$$

энергия излучения.

$$= \frac{46 \cdot V \cdot T^4}{c} = - 3F$$

Закон Больцмана для энергии излучения.

$$E = \frac{46 \cdot V \cdot T^4}{c}$$

гидростатическое давление $p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = \frac{4}{3} \sigma \cdot \frac{T^4}{c} = \frac{1}{3} \frac{E}{V}$

$$p \cdot V = \frac{1}{3} E$$

такая связь между p, V, E обусловлена линейной зависимостью E от p для фотона

$$E = \hbar \cdot \omega = p \cdot c$$

для свободной частицы ($E = \frac{p^2}{2m}$) $\Rightarrow p \cdot V = \frac{2}{3} \cdot E$ (коэф. "2/3")

$$N = \frac{V}{\pi^2 \cdot c^3} \cdot \int_0^\infty \frac{\omega^2 d\omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{T}} - 1} = \frac{V}{\pi^2 \cdot c^3} \cdot \left(\frac{T}{\hbar} \right)^3 \cdot \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{e^x - 1} = \frac{V}{\pi^2 \cdot c^3} \cdot \left(\frac{T}{\hbar} \right)^3 \cdot \Gamma(3) \cdot \zeta(3)$$

число фотонов,
ном. к черн. излучению

$$\Gamma(3) = 2$$

$$\zeta(3) = 1,202$$

$$= \frac{2 \zeta(3)}{\pi^2 \cdot c^3} \cdot \left(\frac{T}{\hbar} \right)^3 \cdot V \approx 0,244 \cdot \left(\frac{T}{\hbar c} \right)^3 \cdot V$$

адиабат. процесс $S = \text{const}$

$$V \cdot T^3 = \text{const}$$

$$T \sim V^{-1/3}$$

$$p \cdot V^{4/3} = \text{const}$$

у-е адиабаты Пуассона

Классический квантовый осциллятор. Продолжение.

$$\overline{\frac{m \cdot V_x^2}{2}} = \frac{\theta}{2} \quad \text{теор. о равновес.-м распределении в кван. эн. по} \\ \text{степеням свободы (имеет место только в}$$

$$\bar{H} = \overline{\frac{m \cdot V^2}{2}} + \overline{\frac{\omega^2 \cdot x^2}{2}} = \frac{\theta}{2} + \frac{\theta}{2} = \theta \quad \text{класс. теории)}$$

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$Z_1 = \sum_n e^{-\frac{E_n}{\theta}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\hbar \omega (n + \frac{1}{2})}{\theta}} = e^{-\frac{\hbar \omega}{2\theta}} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\hbar \omega n}{\theta}} = \frac{e^{-\frac{\hbar \omega}{2\theta}}}{1 - e^{-\frac{\hbar \omega}{\theta}}}$$