

жүйенің $dqdp$ көлемде табылу ықтималдығы $d\omega$ мынаған тең болатындай статистикалық таралу функциясын шығарамыз:

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{dt}{\tau} \rightarrow d\omega = \rho(q, p) dq dp \quad (3)$$

Жүйенің қандай да бір өз күйінде болу ықтималдығы:

$$\int \rho(q, p) dq dp = 1 \quad (4)$$

$\rho(q, p)$ қысқа түрде **таралу функциясы** деп аталады. Мағынасына қарай бұл өрнек жүйенің фазалық кеңістіктегі $dqdp$ элементіне сәйкес нүктелерде табылу ықтималдығының тығыздығы болып табылады (кеңістіктің бірлік көлеміндегі ықтималдық).

Механикалық жүйені сипаттаудың классикалық әдісі. Статистикалық физиканың негізгі міндеттерінің бірі — көп бөлшектерден тұратын макроскопиялық жүйелердің қасиеттерін олардың құрамындағы микроскопиялық бөлшектердің қозғалысымен байланыстыру. Макроскопиялық денені құрайтын бөлшектердің саны өте үлкен болғандықтан, мұндай жүйені жеке бөлшектердің қозғалысын толық қарастыру арқылы зерттеу іс жүзінде мүмкін емес. Сондықтан алдымен жүйенің классикалық механика тұрғысынан қалай сипатталатынын қарастырайық.

Жүйе макроскопиялық дене және ол N бөлшектен тұрсын. Әрбір бөлшек кеңістікте қозғала алатындықтан, оның еркіндік дәрежелерінің саны үшке тең. Демек, жүйенің еркіндік дәрежелерінің жалпы саны: $s = 3N$. Мұндағы: s — жүйенің еркіндік дәрежелерінің саны; N — жүйедегі бөлшектер саны; 3 — бір бөлшектің кеңістіктегі үш еркіндік дәрежесі.

Бір бөлшектің кеңістіктегі орнын үш координата арқылы анықтаймыз: x, y, z

Ал барлық бөлшектердің кеңістіктегі координаталарын жалпылама түрде q_j арқылы белгілейік. Мұнда $j = 1, 2, \dots, 3N$.

Әрбір бөлшектің қозғалысын сипаттау үшін оның импульсін де білу қажет. Бөлшектің импульсі: $p = mv$. Мұндағы: p — бөлшектің импульсі; m — бөлшектің массасы; v — бөлшектің жылдамдығы. Жүйенің толық механикалық күйін анықтау үшін оның барлық бөлшектерінің координаталары мен импульстерін білу керек. Сондықтан жүйенің күйі барлығы $6N$ айнымалы арқылы анықталады: $6N = 2s$

Осылайша классикалық механикада N бөлшектен тұратын жүйенің күйі $3N$ координата және $3N$ импульс арқылы толық сипатталады. Координаталарды:

$q_1, q_2, \dots, q_{3N}$

ал импульстерді:

$p_1, p_2, \dots, p_{3N}$ деп белгілейік.

Қысқаша түрде барлық координаталар жүйесін q , ал барлық импульстер жүйесін p арқылы белгілейміз:

$q = (q_1, q_2, \dots, q_{3N})$

$p = (p_1, p_2, \dots, p_{3N})$

Осы координаталар мен импульстер жүйенің механикалық күйін толық анықтайды.

Гамильтон функциясы. Классикалық механикада көп бөлшекті жүйенің қозғалысын сипаттаудың маңызды әдістерінің бірі — Гамильтондық формализм. Бұл жағдайда жүйенің механикалық күйі координаталар мен импульстер арқылы беріледі, ал жүйенің толық энергиясы Гамильтон функциясы арқылы анықталады.

Қарастырылып отырған жүйенің Гамильтон функциясы:

$$H(q, p) = \sum_{j=1 \dots 3N} p_j^2 / (2m) + U(q)$$

Мұндағы:

$H(q, p)$ — жүйенің Гамильтон функциясы, яғни толық энергиясы;

p_j — j -ші жалпыланған координатаға сәйкес импульс;

m — бөлшектің массасы;

$U(q)$ — жүйенің потенциалдық энергиясы;

$3N$ — жүйенің барлық еркіндік дәрежелерінің саны.

Бұл өрнектің бірінші бөлігі: $\sum_{j=1}^{3N} p_j^2 / (2m)$ жүйенің барлық бөлшектерінің кинетикалық энергияларының қосындысын береді.

Ал $U(q)$ — жүйенің потенциалдық энергиясы. Ол бөлшектердің өзара әсерлесу энергиясын және сыртқы өрістің бөлшектерге әсерінен туындайтын потенциалдық энергияны қамтиды.

Демек: $H = E_{кин} + U$, яғни Гамильтон функциясы жүйенің толық механикалық энергиясына тең. Көп жағдайда жүйенің энергиясы уақыт бойынша сақталатын болса:

$$H(q, p) = E = \text{const}$$

Бұл жерде E — жүйенің толық энергиясы.

Қозғалыстың канондық теңдеулері. Гамильтондық формализмде жүйенің қозғалысы канондық немесе гамильтондық теңдеулер арқылы сипатталады:

$$\begin{aligned} \dot{q}_j &= \partial H / \partial p_j \\ \dot{p}_j &= -\partial H / \partial q_j \end{aligned}$$

Мұндағы:

q_j — q_j координатасының уақыт бойынша өзгеру жылдамдығы;

p_j — p_j импульсінің уақыт бойынша өзгеру жылдамдығы;

H — Гамильтон функциясы;

$\partial H / \partial p_j$ — Гамильтон функциясының p_j бойынша дербес туындысы;

$\partial H / \partial q_j$ — Гамильтон функциясының q_j бойынша дербес туындысы.

Бұл теңдеулер Ньютонның қозғалыс теңдеулеріне эквивалентті. Оны қарапайым мысал арқылы көрсетуге болады. Бір бөлшектің x координатасы үшін:

$$x = q_1$$

ал импульсі:

$$p_1 = m \dot{x} \text{ болады.}$$

Гамильтон функциясы:

$$H = p_1^2 / (2m) + U(x) \text{ түрінде беріلسін.}$$

Бірінші канондық теңдеуден:

$$\dot{x} = \partial H / \partial p_1 = p_1 / m$$

ал $p_1 = m \dot{x}$ болғандықтан, бұл теңдеу дұрыс орындалады. Екінші канондық теңдеу:

$$\dot{p}_1 = -\partial H / \partial x \text{ түрінде жазылады.}$$

Потенциалдық энергия мен күш арасындағы байланыс:

$$F_x = -\partial U / \partial x \text{ болғандықтан:}$$

$$p_1 = F_x$$

Ал: $p_1 = m \dot{x}$ екенін ескерсек: $p_1 = m \dot{x}$

Сондықтан: $m \dot{x} = F_x$ теңдеуін аламыз. Бұл — Ньютонның екінші заңы. Осылайша Гамильтонның канондық теңдеулері классикалық механиканың Ньютон теңдеулеріне толық эквивалентті екенін көреміз.

Жүйенің механикалық күйінің уақыт бойынша өзгеруі. Жүйенің қозғалысы кезінде оның координаталары мен импульстері уақытқа тәуелді болады:

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}(t)$$

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}(t)$$

Демек, жүйенің белгілі бір уақыттағы механикалық күйі оның бастапқы күйіне және қозғалыс заңдарына байланысты анықталады. Механикалық есепті шешу үшін бастапқы шарттар беріледі:

$$q_j(0) = q_{j0}$$

$$p_j(0) = p_{j0}$$

Мұндағы:

q_{j0} — жүйенің бастапқы координатасы;

p_{j0} — жүйенің бастапқы импульсі;

$t = 0$ — бастапқы уақыт мезеті.

Осы бастапқы шарттарды Гамильтон теңдеулеріне қойып, оларды интегралдау арқылы жүйенің кез келген уақыт мезетіндегі күйін анықтауға болады. Бірақ макроскопиялық жүйелер үшін бұл әдістің практикалық тұрғыдан үлкен қиындығы бар. Себебі макроскопиялық денелердегі бөлшектер саны өте үлкен. Мысалы, бір моль заттағы бөлшектер саны Авогадро санына тең:

$$N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$$

Мұндағы:

N_A — Авогадро тұрақтысы;

$6,022 \cdot 10^{23}$ — бір мольдегі бөлшектер саны;

моль^{-1} — зат мөлшерінің өлшем бірлігі.

Сондықтан жүйенің барлық $6N$ айнымалысын анықтап, қозғалыс теңдеулерін жеке-жеке шешу іс жүзінде мүмкін емес. Осыдан статистикалық физиканың негізгі әдістемелік ерекшелігі шығады: **макроскопиялық жүйені сипаттау үшін оның әрбір бөлшегінің нақты қозғалысын анықтау міндетті емес.** Макроскопиялық жүйенің қасиеттерін сипаттау үшін оның статистикалық заңдылықтарын білу жеткілікті. Мысалы, газдың макроскопиялық күйін барлық молекулалардың координаталары мен импульстері арқылы сипаттаудың орнына температура T , көлем V , қысым p және бөлшектер саны N сияқты макроскопиялық параметрлермен сипаттауға болады. Бұл жерде макроскопиялық және микроскопиялық сипаттаудың арасындағы маңызды айырмашылық байқалады. Микроскопиялық деңгейде жүйе бөлшектерінің үздіксіз қозғалысы жүреді. Олардың координаталары мен импульстері үнемі өзгеріп отырады. Бірақ осыған қарамастан жүйенің макроскопиялық күйі тұрақты болуы мүмкін. Мысалы, тепе-теңдіктегі газ молекулалары тоқтаусыз қозғалады. Әрбір молекуланың жылдамдығы мен координатасы уақыт бойынша өзгеріп тұрады. Бірақ газдың температурасы, қысымы және көлемі тұрақты болып қала береді. Осыдан бір макроскопиялық күйге көптеген микроскопиялық күйлер сәйкес келетінін көреміз. Бұл статистикалық физиканың негізгі идеяларының бірі болып табылады.

Фазалық кеңістік. Көп бөлшекті жүйенің микроскопиялық күйін геометриялық түрде көрсету үшін **фазалық кеңістік** ұғымы енгізіледі. N бөлшектен тұратын механикалық жүйе үшін фазалық кеңістік $6N$ өлшемді болады. Оның координаталық осьтері жүйенің $3N$ координатасынан және $3N$ импульсінен құралады.

Яғни фазалық кеңістік:

$(q_1, q_2, \dots, q_{3N}; p_1, p_2, \dots, p_{3N})$ айнымалыларымен анықталады.

Мұндағы:

$q_1, q_2, \dots, q_{3N}$ — барлық координаталар;

$p_1, p_2, \dots, p_{3N}$ — барлық импульстер.

Жүйенің әрбір нақты микроскопиялық күйіне фазалық кеңістіктегі бір нүкте сәйкес келеді. Сондықтан фазалық кеңістіктегі бір нүкте:

$$\Gamma = (q, p)$$

түрінде белгіленуі мүмкін.

Мұндағы:

Γ — жүйенің фазалық кеңістіктегі күйін көрсететін нүкте;

q — барлық координаталар жиынтығы;

p — барлық импульстер жиынтығы.

Жүйе уақыт бойынша қозғалған кезде q және p шамалары өзгереді. Сондықтан фазалық кеңістіктегі сәйкес нүкте де орын ауыстырады. Осы нүктенің уақыт бойынша сызатын қисығы **фазалық траектория** деп аталады. Яғни:

$\Gamma(t) = (q(t), p(t))$ жүйенің фазалық траекториясын сипаттайды. Фазалық траектория жүйенің уақыт бойынша өзгертін микроскопиялық күйін көрсетеді. Егер жүйені өте ұзақ уақыт бойы бақыласақ, фазалық нүкте фазалық кеңістіктің белгілі бір аймағында қозғалады. Жүйе өзінің барлық мүмкін микрокүйлерінің барлығына бірдей түспеуі мүмкін, бірақ оған рұқсат етілген көптеген күйлерді аралап шығуы мүмкін. Осы жағдай статистикалық сипаттаудың қажеттілігін көрсетеді.

Фазалық кеңістіктің элементар көлемі. Фазалық кеңістіктен өте кішкентай көлем элементін бөліп алайық. Ол:

$$dq dp = \prod_{j=1 \dots 3N} dq_j dp_j$$

түрінде жазылады.

Мұндағы:

dq — координаталар кеңістігінің элементар көлемі;

dp — импульстер кеңістігінің элементар көлемі;

dq_j — j -ші координатаның элементар өзгерісі;

dp_j — j -ші импульстің элементар өзгерісі;

$\prod$ — барлық j мәндері бойынша көбейтінді.

Бұл фазалық кеңістіктің өте кіші аймағын білдіреді. Енді жүйені өте үлкен τ уақыт аралығында бақылайық. Жүйе осы бақылау уақытында фазалық кеңістіктің белгілі бір $dq dp$ көлемінде қандай да бір dt уақыт аралығын өткізсін. Онда: dt/τ қатынасы жүйенің фазалық кеңістіктің осы элементінде болу уақытын сипаттайды. Бақылау уақыты жеткілікті үлкен болған кезде:

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} dt/\tau$$

жүйенің берілген фазалық кеңістік элементінде болу ықтималдығын анықтауға мүмкіндік береді. Бұл идея статистикалық таралу функциясын енгізуге негіз болады.

Статистикалық таралу функциясы. Статистикалық физикада жүйенің фазалық кеңістіктегі күйлерінің таралуын сипаттау үшін **статистикалық таралу функциясы** енгізіледі.

Таралу функциясын: $\rho(q, p)$ деп белгілейік. Оның негізгі мағынасы — фазалық кеңістіктің бірлік көлеміне сәйкес келетін жүйенің күйінің ықтималдық тығыздығын сипаттау. Фазалық кеңістіктің $dq dp$ элементінде жүйенің табылу ықтималдығы:

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

формуласы арқылы анықталады.

Мұндағы:

$d\omega$ — жүйенің фазалық кеңістіктің берілген элементінде болу ықтималдығы;

$\rho(q, p)$ — статистикалық таралу функциясы;

$dq dp$ — фазалық кеңістіктің элементар көлемі.

Бұл формуланы физикалық тұрғыдан былай түсіндіруге болады: егер фазалық кеңістіктің белгілі бір аймағында $\rho(q, p)$ үлкен болса, онда жүйенің сол аймақта орналасу ықтималдығы жоғары болады. Ал $\rho(q, p)$ аз болған жағдайда жүйенің сол аймақта болуының ықтималдығы төмен болады. Демек, $\rho(q, p)$ — фазалық кеңістіктегі ықтималдықтың тығыздығы. Жүйенің барлық мүмкін күйлерінің ықтималдықтарының қосындысы бірге тең болуы тиіс. Үздіксіз жағдайда бұл шарт интеграл түрінде жазылады:

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

Мұндағы интеграл фазалық кеңістіктің барлық мүмкін аймақтары бойынша алынады. Бұл теңдеу **таралу функциясының нормалану шарты** деп аталады. Оның физикалық мағынасы: жүйе міндетті түрде өзінің мүмкін болатын күйлерінің бірінде болады, сондықтан барлық күйлер бойынша толық ықтималдық бірге тең.

Таралу функциясының физикалық мағынасы. Таралу функциясын түсіну үшін жүйенің фазалық кеңістіктегі қозғалысын қарастырайық. Механикалық тұрғыдан жүйенің күйі фазалық кеңістіктегі бір нүктемен бейнеленеді. Уақыт өткен сайын бұл нүкте фазалық траектория бойымен қозғалады. Ал статистикалық тұрғыдан біз жүйенің фазалық кеңістіктің қай аймақтарында қаншалықты жиі болатынын қарастырамыз. Егер жүйе белгілі бір аймақта ұзақ уақыт болса, оның сол аймақта табылу ықтималдығы жоғары болады. Сондықтан осы аймақта таралу функциясының мәні де жоғары болады.

Ұзақ уақыттағы бақылау үшін ықтималдықты:

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

арқылы анықтауға болады. Осылайша динамикалық сипаттау мен статистикалық сипаттау арасында байланыс орнайды.

Динамикалық сипаттауда: $q(t)$, $p(t)$ жүйенің нақты уақыттағы күйін анықтайды. Ал статистикалық сипаттауда: $\rho(q, p)$ жүйенің мүмкін күйлерінің ықтималдық бойынша таралуын сипаттайды. Бұл айырмашылық статистикалық физиканың негізгі ерекшелігін көрсетеді.

Физикалық шамалардың орташа мәні. Статистикалық таралу функциясының көмегімен кез келген физикалық шаманың орташа мәнін анықтауға болады. Жүйенің микроскопиялық күйіне тәуелді қандай да бір физикалық шама $A(q, p)$ болсын. Оның статистикалық орташа мәні:

$$\langle A \rangle = \int A(q, p) \rho(q, p) dq dp$$

формуласы арқылы анықталады.

Мұндағы:

$\langle A \rangle$ — A шамасының статистикалық орташа мәні;

$A(q, p)$ — жүйенің берілген микроскопиялық күйіндегі физикалық шаманың мәні;

$\rho(q, p)$ — статистикалық таралу функциясы;

$dq dp$ — фазалық кеңістіктің элементар көлемі;

$\int$ — фазалық кеңістіктің барлық мүмкін күйлері бойынша интегралдау.

Бұл өрнек статистикалық физика үшін өте маңызды. Себебі тәжірибеде біз көбінесе жеке бөлшектің нақты күйін емес, микроскопиялық жүйенің орташа сипаттамаларын өлшейміз. Мысалы, жүйенің орташа энергиясын анықтау үшін:

$$\langle E \rangle = \int E(q, p) \rho(q, p) dq dp$$

формуласын қолданамыз. Яғни макрокопиялық деңгейде өлшенетін шамалар микрокопиялық күйлердің статистикалық орташа мәндері ретінде қарастырылады.

Тепе-теңдік күйдегі таралу функциясы. Егер жүйе термодинамикалық тепе-теңдік күйінде болса, оның макрокопиялық параметрлері уақыт бойынша өзгермейді. Мұндай жағдайда таралу функциясы да уақытқа тәуелсіз болуы мүмкін:

$$\rho = \rho(q, p)$$

Яғни таралу функциясы уақытқа тәуелді болмайды. Ал тепе-теңдік күйден ауытқыған жағдайда таралу функциясы уақыт бойынша өзгеруі мүмкін:

$\rho = \rho(q, p, t)$ Мұндағы t — уақыт. Бұл жағдайда жүйенің фазалық кеңістіктегі ықтималдық таралуы уақыт бойынша өзгереді және жүйе біртіндеп жаңа тепе-теңдік күйіне ұмтылуы мүмкін. Статистикалық таралу функциясы кейінгі тақырыптарда тепе-теңдік статистикалық физиканың негізгі таралуларын — Максвелл, Больцман, канондық және микроканондық таралуларды қарастыруға негіз болады.

Сонымен, классикалық механикада N бөлшектен тұратын жүйенің күйін толық сипаттау үшін $3N$ координата және $3N$ импульс, яғни барлығы $6N$ айнымалы қажет. Жүйенің қозғалысы Гамильтон функциясы арқылы сипатталып, оның уақыт бойынша өзгерісі канондық теңдеулермен анықталады.

Алайда макрокопиялық жүйелерде бөлшектер саны өте үлкен болғандықтан, барлық бөлшектердің қозғалысын жеке-жеке анықтау мүмкін емес. Сондықтан статистикалық физикада жүйені сипаттаудың статистикалық әдісі қолданылады.

Жүйенің барлық микрокопиялық күйлері $6N$ өлшемді фазалық кеңістіктегі нүктелер арқылы бейнеленеді. Жүйенің уақыт бойынша қозғалысы фазалық траекторияны түзеді.

Фазалық кеңістіктегі күйлердің таралуын сипаттау үшін $\rho(q, p)$ статистикалық таралу функциясы енгізіледі. Оның көмегімен жүйенің берілген фазалық кеңістіктің элементінде болу ықтималдығын және физикалық шамалардың орташа мәндерін анықтауға болады. Негізгі байланыстар:

$$H(q, p) = \sum p_j^2 / (2m) + U(q)$$

$$q_j \dot{p}_j = \partial H / \partial p_j$$

$$= -\partial H / \partial q_j$$

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

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

$$\langle A \rangle = \int A(q, p) \rho(q, p) dq dp$$

Осы ұғымдар статистикалық физиканың әрі қарайғы бөлімдерін меңгерудің теориялық негізін құрайды.

Бақылау сұрақтары:

1. Механикалық жүйе дегеніміз не және оны сипаттаудың классикалық әдісінің негізгі мақсаты қандай?
2. N бөлшектен тұратын жүйенің еркіндік дәрежелерінің саны қалай анықталады?
3. Неліктен N бөлшектен тұратын жүйенің еркіндік дәрежесі $s = 3N$ -ге тең?
4. Классикалық механикада жүйенің толық механикалық күйін сипаттау үшін неше айнымалы қажет?
5. Бөлшектің координаталары мен импульстері арқылы оның механикалық күйі қалай сипатталады?
6. Бөлшектің импульсі дегеніміз не? Оның формуласын жазыңыз және шамалардың физикалық мағынасын түсіндіріңіз.
7. Гамильтон функциясы дегеніміз не және оның физикалық мағынасы қандай?
8. Көп бөлшекті жүйенің Гамильтон функциясы қандай түрде жазылады?

9. $U(q)$ потенциалдық энергиясы нені сипаттайды?
10. Гамильтонның канондық теңдеулерін жазыңыз және олардың физикалық мағынасын түсіндіріңіз.
11. Гамильтонның канондық теңдеулері мен Ньютонның қозғалыс теңдеулерінің арасындағы байланыс қандай?
12. Макроскопиялық жүйелер үшін классикалық механикалық есепті бөлшектердің барлығы үшін жеке-жеке шешу нәтижесінен мүмкін емес?
13. Фазалық кеңістік дегеніміз не?
14. N бөлшектен тұратын жүйенің фазалық кеңістігі неше өлшемді болады?
15. Фазалық кеңістіктің бір нүктесі қандай физикалық мағынаны білдіреді?
16. Фазалық траектория дегеніміз не және ол қалай түзіледі?
17. Фазалық кеңістіктің элементар көлемі $dq dp$ қалай анықталады?
18. Статистикалық таралу функциясы $\rho(q, p)$ дегеніміз не және оның физикалық мағынасы қандай?
19. Статистикалық таралу функциясының нормалану шарты қалай жазылады?
20. Статистикалық таралу функциясының көмегімен физикалық шаманың орташа мәні қалай анықталады?

Пайдаланған әдебиеттер: негізгі әдебиет – [1-7], қосымша әдебиет [1-3].