

Дәріс № 3 Физикалық шамалардың орташа мәндері

Дәріс жоспары: 1) Физикалық шамалардың орташа мәндері.

2) Статистикалық жүйелер ансамблі.

3) Жүйенің статистикалық тәуелсіздігі.

Физикалық шамалардың көпшілігі динамикалық (q) және (p) айнымалыларының функциясы болып табылады: $A = A(q, p)$. Мысалға, жүйенің суммалық импульсі $P(p) = \sum_{i=1}^N p_i$, суммалық импульс моменті $M(q, p) = \sum_{i=1}^N r_i \times p_i$, Гамильтон функциясынан (1) шығатын жүйенің толық энергиясы және т.б. Жүйенің қозғалысы кезінде $q(t)$, $p(t)$ шамалары сонымен қоса $A = A(q(t), p(t))$ шамалары да өзгереді. Бақылаудың τ уақыты мезетіндегі A функциялық шамасының Орташа мәнін есептейік:

$$\bar{A} = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau A(q(t), p(t)) dt_{\tau \rightarrow \infty} \rightarrow \int A(q, p) d\omega = \int A(q, p) \rho(q, p) dq dp$$

Соңғы интегралды бүкіл фазалық кеңістік арқылы интегралдаймыз. $\bar{A}$ шамасы A физикалық шамасының статистикалық орташа мәні болып табылады. A физикалық шамасын өлшеу кезінде өзін уақыттың кезкелген мезетінде, кезкелген мәнді қабылдай алатын кездейсоқ шама ретінде көрсетеді. Кейіннен макроскопиялық жүйелер үшін бұл шама $\bar{A}$ физикалық шамасының статистикалық орташа мәндерін қабылдау ықтималдығы жоғары. $\bar{A}$ шамасынан қатты ауытқитын мәндер алыну ықтималдығы төмен. Жүйе статистикалық тепе-теңдік күйде деп қарастырылады, егер макроскопиялық жүйелерді сипаттайтын шамалар олардың орташа мәндеріне тең болу ықтималдығы жоғары болса. Бұл бүкіл жүйе үшін де олардың макроскопиялық бөлшектері үшін де

дұрыс болып табылады. Статистикалық физикада статистикалық тепе-теңдік күй термодинамикалық тепе-теңдік күйге сәйкес келеді деп алынады.

Статистикалық жүйелер ансамблі

Алғашқы уақыт мезетінде жүйе тепе-теңдік күйде болмасын делік. Уақыттың өтуімен жүйе тепе-теңдік күйге келеді де сол тепе-теңдік күйде ұзақ уақыт болады. Фазалық кеңістіктегі жүйенің макроскопиялық күйін уақыт мезетінде тіркеп алайық:

$$t_n = \delta t \cdot n (n = 1, 2, 3, \dots, M - 1)$$

Кескінделетін M нүктелердің жалпы саны өте көп. Фазалық кеңістікте орналасқан $dqdp$ көлемдегі нүктелер саны мынаған тең $Mdqdp$. Шындығында да, жалпы кескінделетін M нүктелер санына бұл санның қатынасы, фазалық кеңістіктегі жүйені берілген $dqdp$ көлемде болу ықтималдығын береді:

$$\frac{M dqdp}{M} = \rho dqdp = d\omega$$

Сонымен кеңістіктегі кескінделетін нүктелердің M_p тығыздығы ρ таралу функциясына пропорционал. Бір жүйенің уақыт бойынша қозғалысы және оның әртүрлі уақыт мезетіне сәйкес келетін күйлеріне сай кескінделетін нүктелері туралы айтқанда, статистикалық физикада статистикалық физика ұғымы да қолданылады.

Статистикалық ансамбль макропараметрлері бірдей, бірақ әртүрлі микрокүйлерде болатын физикалық жүйелердің өте көп M сандар жиынтығы. Статистикалық ансамбль статистикалық таралу функциясы $\rho(q, p)$ арқылы сипатталуы мүмкін. A физикалық шамасының орташа мәні статистикалық ансамбль бойынша мына өрнекке тең:

$$\frac{\int A(q, p) M_p(q, p) dqdp}{\int M_p(q, p) dqdp} = \int A(q, p) \rho(q, p) dqdp = A$$

Сондықтан A физикалық шамасы статистикалық ансамбль бойынша да орташа мән болып табылады.

Жүйенің статистикалық тәуелсіздігі

Егер жүйе бірбірімен әсерлеспейтін ішкі жүйелерден тұрса, онда олардың бірінің күйі екіншісінің қандай күйде болатына тәуелсіз болады. Бұндай жағдайда толық жүйенің таралу функциясы $\rho(q, p)$ жүйені құрайтын ішкі жүйелердің таралу функцияларының $\rho_1(q^{(1)}, p^{(1)})$ және $\rho_2(q^{(2)}, p^{(2)})$ туындысына тең:

$$\rho(q, p) = \rho_1(q^{(1)}, p^{(1)}) \cdot \rho_2(q^{(2)}, p^{(2)})$$

Шындығында да, фазалық кеңістіктегі бірінші ішкі жүйені $dq^{(1)}dp^{(1)}$ элементте табылу ықтималдығы фазалық кеңістіктегі екінші ішкі жүйе $(q, p)_2$ бойынша интегралына тең:

$$\begin{aligned} d\omega_1 &= \int_{(q,p)_2} \rho(q, p) dqdp = \rho_1(q^{(1)}, p^{(1)}) dq^{(1)} dp^{(1)} \int_{(q,p)_2} \rho_2(q^{(2)}, p^{(2)}) dq^{(2)} dp^{(2)} = \\ &= \rho_1(q^{(1)}, p^{(1)}) dq^{(1)} dp^{(2)}, \end{aligned} \quad (5)$$

(5)-ші өрнек ішкі жүйелердің статистикалық тәуелсіздікөргегі болып табылады. Оны ішкі жүйелердің үлкен санына таралуын жазуға болады:

$$\rho(q, p) = \prod_l \rho_l(q^l, p^l)$$

Макроскопиялық жүйені өте көп бөлшектер санынан тұратын макроскопиялық ішкі жүйелерге бөлейік. Молекулаларлық әсерлесудің радиусы кіші шама болғандықтан, ішкі жүйелердің өзара әсерлесуі тек қана бөліну шекарасындағы бөлшектер тарапына жүзеге асады. Сол себепті ішкі жүйелердің әсерлесуін әлсіз деп санауға болады. Бір ішкі жүйенің күйі екінші ішкі жүйе күйіне тәуелсіз деуге болады. Бұл жағдайда ішкі жүйе квазитұйықталған деп аталады және статистикалық квазитұйықталған болып табылады. Олар үшін жүйенің макроскопиялылығы қаншалықты жоғары болса, (5)-ші қатынастың орындалуы соншалықты дәл болады.

$A(q, p)$ физикалық шамасы екі тәуелсіз ішкі жүйелерге қатысты физикалық шамалардың туындысы болсын:

$$A(q, p) = A_1(q^{(1)}, p^{(1)}) \cdot A_2(q^{(2)}, p^{(2)})$$

$A(q, p)$ шамасының статистикалық орташа мәнін есептейік, яғни статистикалық тәуелсіз жүйелерге қатысты физикалық шамалар бойынша алынатын статистикалық орташа, әр физикалық шама бойынша жеке алынатын статистикалық орташа мәндердің туындысына тең:

$$\begin{aligned} A &= \int \int \rho(q, p) A(q, p) dq dp = \\ &= \int \rho_1(q^{(1)}, p^{(1)}) \cdot A_1(q^{(1)}, p^{(1)}) dq^{(1)} dp^{(1)} \\ &\times \int \int \rho_2(q^{(2)}, p^{(2)}) \cdot A_2(q^{(2)}, p^{(2)}) dq^{(2)} dp^{(2)} \end{aligned}$$

Физикалық шамалардың орташа мәндері. Алдыңғы дәрісте механикалық жүйенің фазалық кеңістіктегі күйін сипаттау және жүйенің күйлерінің таралуын анықтайтын статистикалық таралу функциясы қарастырылды. Енді осы таралу функциясының көмегімен физикалық шамалардың орташа мәндерін қалай анықтауға болатынын қарастырамыз. Статистикалық физиканың негізгі ерекшелігі — макроскопиялық жүйені құрайтын барлық бөлшектердің қозғалысын жеке-жеке қарастырудың орнына олардың статистикалық сипаттамаларын пайдалану. Мысалы, газ молекулаларының әрқайсысының жылдамдығы әртүрлі және уақыт бойынша үздіксіз өзгеріп отырады. Бірақ тәжірибе барысында біз жеке молекуланың жылдамдығын емес, олардың орташа жылдамдығын немесе орташа кинетикалық энергиясын анықтаймыз. Сондықтан статистикалық физикада физикалық шаманың орташа мәні ерекше маңызға ие. Жалпы алғанда, жүйенің қандай да бір физикалық шамасы A болсын. Бұл шама жүйенің макроскопиялық күйіне байланысты болады және оны:

$$A = A(q, p)$$

түрінде көрсетуге болады. Мұндағы:

A — қарастырылып отырған физикалық шама;

q — жүйенің барлық координаталарының жиынтығы;

p — жүйенің барлық импульстерінің жиынтығы.

Егер жүйенің фазалық кеңістіктегі күйі нақты белгілі болса, онда $A(q, p)$ шамасының нақты мәнін анықтауға болады. Бірақ статистикалық физикада жүйенің нақты

микроскопиялық күйін білмеген жағдайда, осы шаманың орташа мәнін анықтаймыз.

Егер фазалық кеңістіктегі жүйенің таралу функциясы: $\rho(q, p)$

болса, онда A физикалық шамасының статистикалық орташа мәні:

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

формуласы арқылы анықталады. Мұндағы:

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

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

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

$dq dp$ — фазалық кеңістіктің элементар көлемі;

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

Бұл формуланың мағынасы өте маңызды. Физикалық шаманың орташа мәнін анықтау кезінде әрбір мүмкін микроскопиялық күйдің мәні сол күйдің ықтималдығына көбейтіледі және барлық мүмкін күйлер бойынша қосылады. Дискретті күйлер үшін осы идеяны былай жазуға болады:

$$\langle A \rangle = \sum A_i P_i$$

Мұндағы:

A_i — жүйенің i -ші күйіндегі физикалық шаманың мәні;

P_i — жүйенің i -ші күйде болу ықтималдығы;

$\sum$ — барлық мүмкін күйлер бойынша қосынды.

Ал күйлер саны үздіксіз болған жағдайда қосынды интегралмен алмастырылады. Статистикалық таралу функциясы нормаланған болуы керек:

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

Бұл шарт жүйенің барлық мүмкін күйлерінің толық ықтималдығы бірге тең екенін білдіреді.

Орташа мәннің физикалық мағынасы. Физикалық шаманың орташа мәні бір ғана өлшеу нәтижесі емес. Ол жүйені көп рет бақылау немесе өте ұзақ уақыт бойы бақылау нәтижесінде алынатын статистикалық сипаттама. Мысалы, газдағы молекулалардың жылдамдықтары бірдей емес. Бір молекула баяу, екіншісі жылдам қозғалуы мүмкін. Бірақ молекулалардың саны өте көп болғандықтан, олардың қозғалысын статистикалық тұрғыдан сипаттауға болады. Егер белгілі бір физикалық шаманы көп рет өлшесек:

$$A_1, A_2, A_3, \dots, A_n$$

онда оның арифметикалық орташа мәні:

$$A_{\text{орт}} = (A_1 + A_2 + \dots + A_n) / n$$

түрінде анықталады. Мұндағы:

$A_1, A_2, \dots, A_n$ — өлшеу нәтижелері;

n — өлшеулер саны;

$A_{\text{орт}}$ — арифметикалық орташа мән.

Өлшеулер саны артқан сайын тәжірибелік орташа мән теориялық статистикалық

орташа мәнге жақындайды. Статистикалық физикада осы қасиет өте маңызды, себебі макроскопиялық жүйелердегі бөлшектер саны өте үлкен. Сондықтан орташа шамалар тұрақты және өлшенетін физикалық шамалар ретінде көрінеді.

Физикалық шамалардың орташа мәндерін есептеу. Статистикалық әдіс арқылы көптеген физикалық шамалардың орташа мәндерін анықтауға болады. Мысалы, бөлшектердің орташа кинетикалық энергиясы:

$$\langle E_{\text{кин}} \rangle = \langle mv^2 / 2 \rangle$$

түрінде жазылады. Мұндағы:

m — бөлшектің массасы;

v — бөлшектің жылдамдығы;

$E_{\text{кин}}$ — бөлшектің кинетикалық энергиясы.

Идеал газ үшін молекулалардың орташа кинетикалық энергиясы температурамен байланысты:

$$\langle E_{\text{кин}} \rangle = (3/2) k_B T$$

Мұндағы:

$\langle E_{\text{кин}} \rangle$ — бір молекуланың орташа кинетикалық энергиясы;

k_B — Больцман тұрақтысы;

T — абсолюттік температура.

Бұл формула температураның микроскопиялық мағынасын көрсетеді: **температура жүйе бөлшектерінің орташа кинетикалық қозғалыс энергиясымен байланысты.** Жүйенің ішкі энергиясы да бөлшектердің микроскопиялық энергияларының статистикалық қосындысы ретінде қарастырылады. Осылайша статистикалық физикада макроскопиялық физикалық шамалар микроскопиялық шамалардың орташа мәндерімен байланыстырылады.

Статистикалық жүйелер ансамблі. Көп бөлшекті жүйенің нақты микроскопиялық күйін уақыттың белгілі бір мезетінде анықтау қиын. Сонымен қатар бірдей макроскопиялық параметрлері бар жүйелердің микроскопиялық күйлері әртүрлі болуы мүмкін. Осы мәселені шешу үшін статистикалық физикада **статистикалық ансамбль** ұғымы енгізіледі. Статистикалық ансамбль — макроскопиялық параметрлері бірдей, бірақ микроскопиялық күйлері әртүрлі болуы мүмкін көптеген біртекті жүйелердің ойша алынған жиынтығы. Басқаша айтқанда, біз нақты бір жүйені ғана емес, бастапқы макроскопиялық жағдайлары бірдей көптеген жүйелердің жиынтығын қарастырамыз. Мысалы, бірдей көлемдегі, бірдей температурадағы және бірдей бөлшектер санынан тұратын көптеген газ үлгілерін қарастырайық. Олардың барлығы бірдей макроскопиялық күйде болғанымен, белгілі бір мезетте молекулаларының координаталары мен импульстері әртүрлі болады.

Осы жүйелердің барлығы статистикалық ансамбльді құрайды. Ансамбльдің әрбір мүшесі фазалық кеңістіктегі белгілі бір нүктемен сипатталады. Яғни:

$$\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \dots, \Gamma_M$$

Мұндағы:

Γ_i — ансамбльдің i -ші жүйесінің фазалық кеңістіктегі күйі;

M — ансамбльдегі жүйелердің саны.

Ансамбльдегі жүйелер саны өте үлкен деп есептеледі: $M \gg 1$

Мұндағы >> белгісі әлдеқайда үлкен дегенді білдіреді. Ансамбльдегі жүйелердің әртүрлі микроскопиялық күйлерде орналасуы статистикалық таралу функциясымен сипатталады. Статистикалық ансамбль ұғымы жүйенің уақыт бойынша өзгерісін бақылауға балама ретінде қарастырылуы мүмкін. Яғни бір жүйені ұзақ уақыт бақылаудың орнына, бірдей жағдайдағы көптеген жүйелердің белгілі бір уақыттағы күйлерін қарастыруға болады. Бұл екі тәсілдің арасында маңызды байланыс бар. Біріншісі — **уақыт бойынша орташалау**. Екіншісі — **ансамбль бойынша орташалау**. Статистикалық физиканың негізгі идеяларының бірі — белгілі бір жағдайларда осы екі орташа мәннің бір-біріне сәйкес келуі.

Уақыт бойынша және ансамбль бойынша орташа мән. Белгілі бір физикалық шаманың уақыт бойынша орташа мәнін:

$$\bar{A} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} (1/\tau) \int_0^\tau A(t) dt$$

түрінде жазуға болады. Мұндағы:

$\bar{A}$ — физикалық шаманың уақыт бойынша орташа мәні;

τ — бақылау уақыты;

$A(t)$ — физикалық шаманың уақыт бойынша өзгеруі;

$\int$ — уақыт бойынша интегралдау.

Ал ансамбль бойынша орташа мән:

$$\langle A \rangle = \int A(q, p) \rho(q, p) dq dp \text{ формуласы арқылы анықталады.}$$

Егер жүйе эргодикалық қасиетке ие болса, жеткілікті ұзақ уақыт аралығында алынған уақыттық орташа мән ансамбльдік орташа мәнге тең болады:

$$\bar{A} = \langle A \rangle$$

Бұл теңдік статистикалық физиканың теориялық негіздерінің бірі болып табылады. Оның физикалық мағынасы: бір жүйені өте ұзақ уақыт бақылау арқылы алынған орташа мәнді бірдей жағдайдағы көптеген жүйелерден құралған ансамбль бойынша алынған орташа мәнмен алмастыруға болады.

Жүйенің статистикалық тәуелсіздігі. Статистикалық физикада бірнеше жүйеден тұратын күрделі жүйелерді қарастырғанда олардың бір-біріне әсер ету дәрежесін анықтау маңызды. Егер екі жүйе бір-бірімен өзара әсерлеспесе немесе олардың арасындағы әсерді елемеуге болатын болса, оларды **статистикалық тәуелсіз жүйелер** деп қарастыруға болады. Мысалы, екі газ ыдысы бір-бірінен толық оқшауланған болсын. Бірінші ыдыстағы газ молекулалары екінші ыдыстағы молекулаларға әсер етпейді. Мұндай жағдайда екі жүйені статистикалық тәуелсіз деп қарастыруға болады.

Егер бірінші жүйенің күйін сипаттайтын таралу функциясы:

$$\rho_1(q_1, p_1)$$

ал екінші жүйенің таралу функциясы:

$$\rho_2(q_2, p_2)$$

болса, тәуелсіз жүйелердің біріккен таралу функциясы олардың таралу функцияларының көбейтіндісі түрінде жазылады:

$$\rho(q_1, p_1, q_2, p_2) = \rho_1(q_1, p_1) \cdot \rho_2(q_2, p_2)$$

Мұндағы:

ρ — екі жүйенің біріккен таралу функциясы;

ρ_1 — бірінші жүйенің таралу функциясы;

ρ_2 — екінші жүйенің таралу функциясы;

q_1, p_1 — бірінші жүйенің координаталары мен импульстері;

q_2, p_2 — екінші жүйенің координаталары мен импульстері.

Бұл теңдеу статистикалық тәуелсіздіктің негізгі математикалық шарты болып табылады. Жүйелер саны екіден көп болған жағдайда:

$$\rho = \rho_1 \cdot \rho_2 \cdot \dots \cdot \rho_n$$

түрінде жазылады. Мұндағы ρ_i — ансамбльдегі i -ші тәуелсіз жүйенің таралу функциясы. Бұл қасиетті ықтималдықтар теориясындағы тәуелсіз оқиғалармен салыстыруға болады. Егер екі оқиға бір-біріне тәуелсіз болса, олардың бір уақытта орындалу ықтималдығы жеке ықтималдықтарының көбейтіндісіне тең болады. Сол сияқты статистикалық тәуелсіз жүйелердің біріккен таралу функциясы жеке таралу функцияларының көбейтіндісіне тең.

Жүйелердің энергиясы және статистикалық тәуелсіздік. Егер екі жүйе бір-бірімен әсерлеспесе, олардың толық энергиясы жеке жүйелер энергияларының қосындысынан тұрады:

$$E = E_1 + E_2$$

Мұндағы:

E — екі жүйенің толық энергиясы;

E_1 — бірінші жүйенің энергиясы;

E_2 — екінші жүйенің энергиясы.

Ал егер жүйелер арасында өзара әсерлесу болса, толық энергия:

$$E = E_1 + E_2 + E_{12}$$

түрінде жазылады. Мұндағы:

E_{12} — бірінші және екінші жүйелер арасындағы өзара әсерлесу энергиясы. Егер E_{12} шамасы елеусіз аз болса, жүйелерді жуықтап статистикалық тәуелсіз деп есептеуге болады. Бұл жағдайда жүйелердің күйлері бір-біріне тәуелсіз таралады.

Статистикалық тәуелсіздіктің физикалық мағынасы. Статистикалық тәуелсіздік ұғымын тек жүйелердің кеңістіктік бөлінуі ретінде түсінбеу керек. Негізгі шарт — бір жүйенің күйі туралы ақпарат екінші жүйенің күйінің ықтималдығын өзгертпеуі. Мысалы, екі жүйе бір-бірінен алшақ орналасқан және олардың арасында өзара әсерлесу жоқ болса, бірінші жүйенің молекулаларының қозғалысы екінші жүйенің молекулаларының қозғалысына әсер етпейді. Сондықтан олардың таралу функциялары көбейтінді түрінде жазылады.

Ал жүйелер арасында күшті өзара әсерлесу болған жағдайда олардың күйлері статистикалық байланысқан болады. Мұндай жағдайда жалпы таралу функциясын жеке таралу функцияларының қарапайым көбейтіндісі түрінде жазуға болмайды.

Статистикалық тәуелсіздік ұғымы көптеген бөлшектерден тұратын жүйелерді зерттеуде өте маңызды. Себебі күрделі жүйені өзара тәуелсіз ішкі жүйелерге бөлу арқылы оның статистикалық қасиеттерін зерттеу айтарлықтай жеңілдейді.

Бақылау сұрақтары:

1. Физикалық шаманың статистикалық орташа мәні дегеніміз не?
2. Физикалық шаманың орташа мәні қандай формуламен анықталады?
3. Статистикалық таралу функциясы $\rho(q,p)$ нені сипаттайды?
4. Статистикалық таралу функциясының нормалану шарты қалай жазылады?
5. Идеал газ бөлшегінің орташа кинетикалық энергиясы температурамен қалай байланысады?
6. Статистикалық ансамбль дегеніміз не?
7. Статистикалық ансамбльге кіретін жүйелердің макроскопиялық және микроскопиялық күйлері немен ерекшеленеді?
8. Уақыт бойынша орташа мән дегеніміз не және ол қалай анықталады?
9. Эргодикалық гипотеза нені білдіреді?
10. Статистикалық тәуелсіз жүйелер деп қандай жүйелерді айтамыз және олардың таралу функциясы қалай жазылады?
11. Физикалық шаманың статистикалық орташа мәні қалай анықталады?
12. Дисперсия ұғымы нені сипаттайды және оның физикалық мағынасы қандай?
13. Физикалық шаманың орташа квадраттық флуктуациясы қалай анықталады?
14. Орташа квадраттық флуктуация мен дисперсияның арасында қандай байланыс бар?
15. Салыстырмалы флуктуация дегеніміз не және ол қандай формула арқылы анықталады?
16. Жүйедегі бөлшектер саны артқан кезде салыстырмалы флуктуация қалай өзгереді және оның статистикалық физикадағы маңызы қандай?

Пайдаланған әдебиеттер: негізгі әдебиет – [2-5], қосымша әдебиет [1,2].