

Дәріс № 5 Фазалық кеңістік туралы түсінік

Дәріс жоспары: 1) Лиувилль теоремасы.
2) Тұйықталған жүйе қозғалысының интегралы.
3) Тұйықталған жүйе қозғалысының таралу функциясы.

Лиувилль теоремасы

N өлшектен тұратын тұйық жүйені, яғни сыртқы денелермен әсерлеспейтін механикалық жүйені қарастырайық. Механикада бұл жүйе жүйенің қозғалыс теңдеуіне (2) әкелетін Гамильтон функциясының (1) тұрғызылуымен анықталады. Сонымен қатар M жүйеден тұратын және таралу функциясымен $\rho(q, p)$ сипатталатын статистикалық ансамбльді де қарастырамыз. Кескінделетін ансамбль жүйелерінің нүктелері $M_p(q, p)$ тығыздығы болатын $6N$ өлшемді фазалық кеңістікте таралсын. Енді әрбір ансамбльдің жүйелері уақыт бойынша қозғалыс теңдеуіне (канондық) сәйкес өссін. Кескінделетін нүктелер өздерінің фазалық траекторияларында қозғалсын. Фазалық траекториялардың қиылысуы, бастапқы күйге сәйкес қиылысу нүктесінде жүйе екі түрлі жолмен өсетінін көрсететін еді. Ал бұл бастапқы шарты берілген механикалық есептің дербес бір ғана шешімі болатындығын жоққа шығарады.

Таралу функциясы уақытқа тікелей немесе импульс және координаттар арқылы тәуелді болуы мүмкін:

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

Фазалық траекториялардың қиылыспайтындығы, яғни бірбіріне қосылып немесе еселеніп кетпеуі, олардың кескінделетін нүктелерінің қозғалысы уақыт бойынша өзгермейтіндігінің дәлелі болып табылады. Фазалық кеңістіктен қандайда бір көлемді бөліп алайық. Бөлініп алынған көлемдегі бөлшектер санының өзгерісі сол көлемге бөлшектердің құйылуы немесе ағып кетуі есебінен ғана болуы мүмкін. Фазалық кеңістікте жүйенің кескіндейтін нүктелер санының сақталуы үздіксіздік теңдеуімен сипатталады.

Үш өлшемді кеңістіктегі заттардың санының сақталуын сипаттайтын үздіксіздік теңдеуі мына түрде жазылады:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho v) = 0$$

$\rho(r(t), t)$ газ тығыздығы, $v(r(t), t)$, t уақыт мезетіндегі радиус векторы $r(t)$ болатын бөлшектің жылдамдығы. Кескінделетін газ нүктелері тығыздығы $M \cdot \rho(q, p)$ болатын $6N$ өлшемді фазалық кеңістіктегі q_j, p_j координаттарының $6N$ айнымалылары, ал жылдамдықтары q_y, p_y туындылары $6N$ болатын үздіксіздік теңдеуіне бағынуы қажет.

$$\frac{\partial(M\rho)}{\partial t} + \sum_{j=1}^{3N} \left(\frac{\partial}{\partial q_j} (M\rho \cdot \dot{q}_j) + \frac{\partial}{\partial p_j} (M\rho \cdot \dot{p}_j) \right) = 0$$

M қысқартылып, дифференциалдау операциясын қолданғаннан кейін мына өрнекті аламыз:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{j=1}^{3N} \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial \rho}{\partial p_j} \dot{p}_j \right) + \sum_{j=1}^{3N} \rho \left(\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_j} + \frac{\partial \dot{p}_j}{\partial p_j} \right) = 0$$

Соңғы теңдік канондық қозғалыс теңдеуіне (2) сәйкес нөлге тең

$$\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_j} + \frac{\partial \dot{p}_j}{\partial p_j} = \frac{\partial^2 H}{\partial q_j \partial p_j} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_j \partial q_j} = 0$$

Үздіксіздік теңдеуі мына түрге келеді:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{j=1}^{3N} \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial \rho}{\partial p_j} \dot{p}_j \right) = \frac{d\rho}{dt} = 0$$

Немесе q_y және p_y (2) алмастырсак:

$$\frac{d\rho}{dt} + [\rho, H] = 0$$

$$[\rho, H] = \sum_{j=1}^{3N} \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial \rho}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} \right)$$

$[\rho, H]$ бұл өрнек ρ, H шамалары үшін **классикалық Пуассон жақшалары** деп аталады.

Фазалық траекторияда қозғалатын таралу функциясы кескінделетін нүктеде тұрақты деген сөз. (Лиувилль теоремасының бірінші тұжырымдамасы)

Фазалық кеңістікте ΔM кескінделетін нүктелерден тұратын $\Delta q \Delta p$ көлемін бөліп алайық. Онда

$$\Delta q \Delta p \cdot (M\rho) = \Delta M.$$

Фазалық траектория қозғалысы кезінде тығыздық тұрақты болуымен қатар, фазалық кеңістіктегі канондық қозғалыс теңдеуіне сәйкес қозғалатын, кескінделетін нүктелермен толтырылған көлем де тұрақты (Лиувилль теоремасының екінші тұжырымдамасы). Мұны басқаша тұжырымдауға болады: кескінделетін газ нүктелері канондық теңдеуге сәйкес сығылмайтын сұйықтық сияқты қозғалады. (Лиувилль теоремасының үшінші тұжырымдамасы).

Стационарлық таралу функциясы үшін $\left(\frac{d\rho}{dt} = 0 \right)$ уақытты тәуелді емес

$$[\rho, H] = 0$$

Тұйықталан жүйе қозғалысының интегралы және таралу функциясы

Кез келген f физикалық шама уақыт, координат және импульс бойынша функциясы болып табылады:

$$f = f(t, q(t), p(t)).$$

Физикалық шаманың уақыт бойынша толық өзгеруін оның толық туындысы арқылы анықталады

$$\frac{df}{dt} = \frac{df}{dt} + \sum_{j=1}^{3N} \left(\frac{df}{dq_j} q_j + \frac{df}{dp_j} p_j \right) = \frac{df}{dt} + [f, H].$$

Егер f шама уақыт бойынша өзгермесе, онда оны **қозғалыс интегралы** деп атайды. Қозғалыс интегралы үшін:

$$\frac{df}{dt} = 0$$

Егер физикалық шама уақытқа ($\frac{df}{dt} = 0$) тәуелді болмаса, онда

$$[f, H] = 0$$

Стационарлық жағдайда таралу функциясы $\rho = \rho(q, p)$ қозғалыс интегралы болып табылады, демек, өздері қозғалыс интегралы болатын импульс және координаталар комбинацияларына тәуелді.

$$\ln \rho(q, p) = \sum_l \ln \rho_l(q^{(l)}, p^{(l)})$$

екенін ескерсек, онда физикалық шама аддитивті болып табылады. Сондықтан $\ln \rho$ және таралу функциясының өзі ρ координаталар және импульс комбинацияларына тәуелді, олар **аддитивті қозғалыс интегралы** болып табылады.

Тұйықталған механикалық жүйеде жеті аддитивті қозғалыс интегралы болады: энергия $E = H(q, p)$, импульс $\mathbf{P}$ (үш интеграл), және импульс моменті $\mathbf{M}$ (үш интеграл). Тұйықталған жүйеде импульс және импульс моменті бірқалыпты үдемелі қозғалыспен және толық айналумен байланысты.

Егерде қозғалысты қарастырмай, яғни жүйені тыныштықта деп алсақ, онда таралу функциясы ρ жалғыз ғана аддитивті қозғалыс интегралына тәуелді болады, яғни $E = H(q, p)$ энергиясынан:

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

Кез- келген $\rho(H(q, p))$ функциясы Лиувилль теоремасын қанағаттандырады және макроскопиялық жүйелердің статистикалық қасиеттерін сипаттау үшін қолданылады.

Статистикалық физикада макроскопиялық жүйенің қасиеттерін сипаттау үшін оның микроскопиялық күйлерінің статистикалық таралуын қарастырамыз. Жүйенің микроскопиялық күйі фазалық кеңістіктегі бір нүктемен сипатталады. Бұл нүктенің координаталары ретінде барлық жалпыланған координаталар мен оларға сәйкес импульстер алынады: $(q_1, q_2, \dots, q_{3N}; p_1, p_2, \dots, p_{3N})$. Мұндағы: q_j — жүйенің жалпыланған координаталары; p_j — осы координаталарға сәйкес жалпыланған импульстер; N — жүйедегі бөлшектер саны; $3N$ — жүйенің еркіндік дәрежелерінің саны.

Фазалық кеңістіктің өлшемі $6N$ -ге тең. Жүйенің қозғалысы кезінде оның фазалық кеңістіктегі бейнесі уақыт бойынша өзгереді. Егер бастапқы уақытта жүйелердің белгілі бір

тобы фазалық кеңістіктің белгілі бір аймағында орналасса, уақыт өте келе бұл аймақтың пішіні өзгеруі мүмкін. Осы жағдайда маңызды сұрақ туындайды: жүйенің фазалық кеңістіктегі таралу тығыздығы уақыт бойынша өзгере ме? Бұл сұраққа **Лиувилль теоремасы** жауап береді. Лиувилль теоремасының негізгі тұжырымы: **Гамильтондық жүйенің фазалық кеңістіктегі таралу функциясы жүйенің қозғалысы кезінде фазалық траектория бойымен тұрақты болып қалады.**

Басқаша айтқанда, фазалық кеңістіктегі жүйелердің белгілі бір ансамблінің тығыздығы қозғалыс барысында сақталады. Таралу функциясын $\rho(q,p,t)$ деп белгілейік. Оның уақыт бойынша толық туындысы:

$$d\rho/dt = \partial\rho/\partial t + \sum_{j=1}^{3N} [(\partial\rho/\partial q_j)\dot{q}_j + (\partial\rho/\partial p_j)\dot{p}_j].$$

Мұндағы: $\rho(q,p,t)$ — фазалық кеңістіктегі таралу функциясы; t — уақыт; $\partial\rho/\partial t$ — таралу функциясының уақыт бойынша дербес туындысы; $\dot{q}_j$ — жалпыланған координатаның уақыт бойынша өзгеру жылдамдығы; $\dot{p}_j$ — жалпыланған импульстің уақыт бойынша өзгеру жылдамдығы.

Гамильтонның канондық теңдеулері: $\dot{q}_j = \partial H/\partial p_j$,

$\dot{p}_j = -\partial H/\partial q_j$. Мұндағы:

H — жүйенің Гамильтон функциясы, яғни толық энергиясы; q_j — жалпыланған координата; p_j — жалпыланған импульс.

Осы теңдеулерді таралу функциясының туындысына қойсақ:

$$d\rho/dt = \partial\rho/\partial t + \sum_{j=1}^{3N} [(\partial\rho/\partial q_j)(\partial H/\partial p_j) - (\partial\rho/\partial p_j)(\partial H/\partial q_j)].$$

Жақша ішіндегі өрнек **Пуассон жақшасы** арқылы жазылады:

$$\{\rho, H\} = \sum_{j=1}^{3N} [(\partial\rho/\partial q_j)(\partial H/\partial p_j) - (\partial\rho/\partial p_j)(\partial H/\partial q_j)].$$

Сондықтан: $d\rho/dt = \partial\rho/\partial t + \{\rho, H\}$.

Тұйық Гамильтондық жүйе үшін Лиувилль теңдеуі: $\partial\rho/\partial t + \{\rho, H\} = 0$. Бұл теңдеу статистикалық физиканың негізгі теңдеулерінің бірі болып табылады. Ал таралу функциясын фазалық траектория бойымен қарастырсақ:

$$d\rho/dt = 0.$$

Бұл — **Лиувилль теоремасының математикалық түрі**. Оның физикалық мағынасы: фазалық кеңістіктегі жүйелер ансамблінің қозғалысы кезінде фазалық сұйықтық сығылмайды және кеңеймейді. Яғни фазалық кеңістіктің белгілі бір аймағындағы жүйелер санының тығыздығы қозғалыс бойымен сақталады.

Фазалық көлемнің сақталуы. Лиувилль теоремасын фазалық көлемнің сақталуы тұрғысынан да түсіндіруге болады. Фазалық кеңістіктің элементар көлемі:

$$d\Gamma = dq dp = \prod_{j=1}^{3N} dq_j dp_j.$$

Мұндағы: $d\Gamma$ — фазалық кеңістіктің элементар көлемі; dq_j — жалпыланған координата бойынша элемент; dp_j — жалпыланған импульс бойынша элемент.

Жүйенің уақыт бойынша қозғалысы кезінде бұл фазалық көлемнің пішіні өзгеруі мүмкін, бірақ оның толық көлемі сақталады:

$$d\Gamma(t) = d\Gamma(0).$$

Мұндағы: $d\Gamma(0)$ — бастапқы уақыттағы фазалық көлем; $d\Gamma(t)$ — t уақытындағы фазалық көлем.

Бұл нәтиже Гамильтон теңдеулерінің қасиеттерінен шығады. Фазалық кеңістіктің көлемі сақталатындықтан, фазалық кеңістіктегі жүйелер ансамблінің статистикалық таралуы да белгілі бір заңдылықпен өзгереді. Лиувилль теоремасы осы себепті статистикалық ансамбльдердің уақыт бойынша эволюциясын зерттеудің математикалық негізін құрайды.

Тұйық жүйе туралы түсінік. Статистикалық физикада **тұйық жүйе** деп сыртқы ортамен энергия және бөлшектер алмасуы болмайтын жүйені айтамыз. Идеалдандырылған тұйық жүйе үшін: бөлшектер саны тұрақты; жүйенің толық энергиясы тұрақты; жүйеге сыртқы күштердің әсері ескерілмейді немесе жүйе оқшауланған деп қарастырылады. Мұндай жүйенің негізгі сақталатын шамалары қозғалыстың интегралдары деп аталады.

Тұйық жүйе қозғалысының интегралдары. Механикада жүйенің қозғалысы барысында уақытқа тәуелсіз болып қалатын шамалар **қозғалыс интегралдары** деп аталады. Егер $A(q,p)$ физикалық шамасы уақыт бойынша өзгермесе, онда:

$$dA/dt = 0.$$

Мұндағы: A — жүйенің физикалық шамасы; dA/dt — оның уақыт бойынша толық туындысы. Гамильтон механикасында: $dA/dt = \partial A/\partial t + \{A, H\}$. Егер A шамасы уақытқа айқын тәуелді болмаса, онда:

$$dA/dt = \{A, H\}.$$

Қозғалыс интегралы болу шарты: $\{A, H\} = 0$. Мұндағы: $\{A, H\}$ — A және H шамаларының Пуассон жақшасы; H — Гамильтон функциясы. Тұйық жүйеде ең маңызды қозғалыс интегралдарының бірі — **энергияның сақталу заңы**. Жүйенің толық энергиясы:

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

Егер Гамильтон функциясы уақытқа тікелей тәуелді болмаса:

$\partial H/\partial t = 0$, онда: $dH/dt = 0$. Демек: $H = E = \text{const}$. Мұндағы: H — жүйенің Гамильтон функциясы; E — жүйенің толық энергиясы; const — уақыт бойынша тұрақты шама. Бұл тұйық жүйенің энергиясы уақыт бойынша өзгермейтінін білдіреді.

Импульстің сақталуы. Егер жүйеге сыртқы күштер әсер етпесе және бөлшектердің өзара әсерлесуі ішкі күштермен ғана анықталса, онда жүйенің толық импульсі де сақталады.

Жүйенің толық импульсі: $P = \sum_{i=1...N} p_i$. Мұндағы: P — жүйенің толық импульсі; p_i — i -бөлшектің импульсі; N — жүйедегі бөлшектер саны. Тұйық жүйе үшін: $P = \text{const}$.

Бұл — импульстің сақталу заңы. Егер кеңістіктің белгілі бір бағыттары бойынша жүйенің Гамильтоны координатаға тәуелсіз болса, сол бағыттағы импульстің сәйкес компоненті сақталады. Мысалы:

$$P_x = \text{const}, P_y = \text{const}, P_z = \text{const}.$$

Мұндағы P_x, P_y, P_z — толық импульстің сәйкес компоненттері.

Қозғалыс интегралдарының статистикалық маңызы. Қозғалыс интегралдары жүйенің фазалық кеңістіктегі мүмкін болатын күйлерін шектейді. Мысалы, тұйық жүйенің энергиясы E тұрақты болса, жүйе тек: $H(q,p) = E$ шарты орындалатын фазалық кеңістіктің аймағында ғана қозғала алады. Бұл аймақ **энергия беті** деп аталады. Яғни жүйенің барлық мүмкін микрокүйлері фазалық кеңістіктің бүкіл көлемін қамтымайды. Олар энергияның тұрақты мәніне сәйкес келетін гипербетте орналасады. Бұл қасиет микроканондық ансамбльді енгізу үшін өте маңызды.

Тұйық жүйенің қозғалысының таралу функциясы. Фазалық кеңістікте жүйенің күйін таралу функциясы арқылы сипаттаймыз:

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

Мұндағы: ρ — фазалық кеңістіктегі ықтималдық тығыздығы; q — жалпыланған координаталар жиыны; p — жалпыланған импульстер жиыны; t — уақыт. Таралу функциясы жүйенің фазалық кеңістіктің белгілі бір аймағында орналасу ықтималдығын анықтайды:

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

Мұндағы: $d\omega$ — жүйенің $dq dp$ фазалық көлем элементінде болу ықтималдығы; $\rho(q,p,t)$ — таралу тығыздығы; $dq dp$ — фазалық кеңістіктің элементар көлемі.

Таралу функциясы нормалануы тиіс:

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

Мұндағы: интеграл фазалық кеңістіктің барлық мүмкін күйлері бойынша алынады; 1 — жүйенің қандай да бір мүмкін күйде болу ықтималдығының толық мәні. Тұйық жүйе үшін таралу функциясы Лиувилль теңдеуіне бағынады:

$$\partial \rho / \partial t + \{ \rho, H \} = 0.$$

Ал тепе-теңдік күйінде таралу функциясы уақытқа тәуелді болмайды: $\partial \rho / \partial t = 0$.

Сонда: $\{ \rho, H \} = 0$.

Демек, тепе-теңдік жағдайында таралу функциясы Гамильтон функциясымен коммутативті сипатта болады және қозғалыс кезінде тұрақты сақталатын шамаларға тәуелді болуы мүмкін.

Тұйық жүйе үшін таралу функциясының ерекшелігі. Тұйық жүйенің толық энергиясы тұрақты болғандықтан: $H(q,p) = E$.

Сондықтан тепе-теңдік жағдайында таралу функциясын энергияға тәуелді функция ретінде қарастыруға болады: $\rho(q,p) = \rho(H)$. Яғни: $\rho = \rho(E)$. Мұндағы: ρ — таралу функциясы; H — жүйенің Гамильтон функциясы; E — жүйенің тұрақты толық энергиясы. Тұйық жүйенің барлық мүмкін микрокүйлері энергияның белгілі бір тұрақты мәніне сәйкес келуі тиіс. Егер жүйенің энергиясы E -ге дәл тең болса, онда микрокүйлердің таралуын сипаттау үшін **микрoканондық ансамбль** қолданылады. Микрoканондық ансамбль үшін негізгі шарттар: $E = \text{const}$, $V = \text{const}$, $N = \text{const}$. Мұндағы: E — жүйенің толық энергиясы; V — жүйенің көлемі; N — бөлшектер саны. Бұл ансамбль оқшауланған жүйені сипаттауға қолданылады.

Лиувилль теоремасының статистикалық физикадағы рөлі. Лиувилль теоремасы классикалық механика мен статистикалық физиканың арасындағы байланысты қамтамасыз етеді. Классикалық механика жеке бөлшектердің немесе жүйенің нақты қозғалысын сипаттайды. Ал статистикалық физика бөлшектер саны өте көп жүйелер үшін олардың ықтимал күйлерінің таралуын зерттейді. Лиувилль теоремасы осы екі сипаттаманың арасындағы негізгі көпір болып табылады. Оның көмегімен:

1. фазалық кеңістіктегі таралу функциясының қозғалысын сипаттауға;
2. статистикалық ансамбльдің уақыт бойынша эволюциясын зерттеуге;
3. тепе-теңдік таралуын анықтауға;
4. қозғалыс интегралдарының таралу функциясына әсерін зерттеуге;
5. микрoканондық ансамбльді негіздеуге болады.

Осылайша, Лиувилль теоремасы статистикалық механиканың негізгі теориялық нәтижелерінің бірі болып табылады.

Бақылау сұрақтары:

- 1) Лиувилль теоремасын тұжырымдаңыз.
- 2) Таралу функциясы қандай параметрлермен анықталады?
- 3) Үздіксіздік теңдеуін жазып көрсетіңіз.
- 4) Лиувилль теоремасының физикалық мағынасы қандай және ол фазалық кеңістіктегі жүйенің қозғалысын қалай сипаттайды?
- 5) Лиувилль теңдеуі қалай жазылады және ондағы таралу функциясының өзгеруі нені білдіреді?
- 6) Тұйық жүйе үшін қозғалыс интегралы дегеніміз не? Энергияның сақталуын қозғалыс интегралы ретінде қалай көрсетуге болады?
- 7) Тұйық жүйенің фазалық кеңістіктегі элементар көлемі қалай анықталады және оның сақталуы нені білдіреді?
- 8) Тепе-теңдік күйдегі тұйық жүйенің таралу функциясы қандай қасиетке ие және оның энергияға тәуелділігін қалай түсіндіруге болады?

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