

Дәріс № 6 Статистикалық энтропия анықтамасы

Дәріс жоспары: 1) Энергия бойынша таралу функциясы.

2) Статистикалық энтропия анықтамасы.

Классикалық статистика шеңберінде қала отырып, бөлшектердің кванттық қозғалыс қасиеттерін ескеруге бір қадам жасайық. Кванттық механикаға квазиклассикалық жуықтаудан шығып жатқан, әрбір микрокүй үшін фазалық кеңістіктегі нүкте емес, көлемге h^{3N} (жүйе үшін еркін дәреже саны $3N$) қарсы білдіреді. Фазалық кеңістікте $dqdp$ көлемде микрокүй саны $\frac{dqdp}{h^{3N}}$ -ға тең. Бұдан басқа, кванттық механикаға сәйкес тепе-теңдіктегі бөлшектерді орын ауыстыруымен жаңа микрокүй жүйесін тудырмайды. Сондықтан фазалық кеңістіктер жүйесінде N тепе-тең бөлшектерден $N!$ (N тепе-тең бөлшектерден мүмкін ауыстырылған саны) нүкте бар, бір немесе сол микрожүйеге сәйкес келеді. Қосынды кезінде микрокүйді бүкіл фазалық кеңістік бойынша интегралдамаған жөн, оны $1/N!$ бөлігі бойынша интегралдау тиіс. Толық фазалық кеңістік бойынша интегралдау кезінде оны $N!$ бөлу керек.

Таралу функциясы үшін нормаланған интеграл мына түрде жазайық:

$$\int \rho(H(q, p)) d\Gamma = 1, \quad d\Gamma = \frac{dqdp}{h^{3N}N!}$$

бұл жерде бүкіл фазалық кеңістікте интегралдау жүргізіледі.

Таралу функциясы $\rho(H(q, p))$ микрокүйде жүйені табудың ықтимал тығыздық мағынасын білдіреді, ол (q, p) нүктесінде фазалық кеңістікке сәйкес келеді.

$\Gamma(E')$ — фазалық кеңістіктегі көлем ішіндегі микрокүй саны, ол $H(q, p) = E'$ гиперкеңістік бойынша шектелген тұрақты энергия.

Ендеше

$$d\Gamma(E') = \frac{d\Gamma(E')}{dE'} dE' \equiv g(E') dE'$$

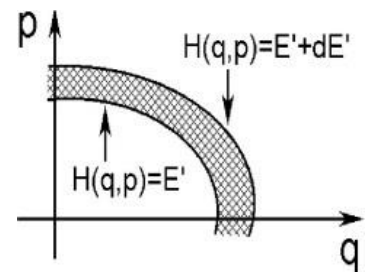
$H(q, p) = E'$ және $H(q, p) = E' + \partial E'$ бір-біріне жақын екі гиперкеңістік арасындағы фазалық кеңістік қабатының микрокүй саны. (2 суретті қараңыз)

Нормалау интегралында айнымалыны алмастыру жасаймыз. Соның біреуін E' түрінде аламыз, қалғаны- еркін түрде.

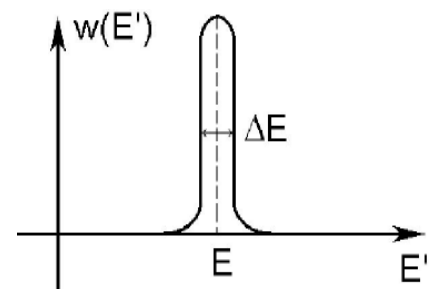
$$\int \rho(E') q(E') dE' = 1, \text{ бұл кезде } \int q(E') dE' = \int_{E' \leq H(q,p) = E' + \partial E'} d\Gamma$$

$\partial E'$ энергия интервалындағы микрокүй саны.

$\omega(E') = \rho(E') q(E')$ -шамасы E' энергиямен күй тығыздық санының мағынасын білдіреді (**энергия бойынша таралу функциясы**). Аддитивті физикалық шама ($\sim \Delta E$ флуктуация энергиясы) флуктуациясы микрокүйде кішкентай болғандықтан, $\omega(E')$ функциясы 3 суреттегі түрге келеді. $\omega(E')$ функциясы іс- жүзінде ΔE тар областа $E = \bar{H}(\bar{q}, \bar{p})$ энергияның орта мәнінен



2-сурет. Екі жақын гиперкеңістік арасындағы фазалық кеңістік қабаты.



нөлден өзгеше болады. ΔE энергиясы нөлге тең аралықтан тыс және $\omega(E') = \rho(E')q(E')$ тұрақты шама ішінде болатындай ол функцияны аппроксимациялаймыз. Онда нормалау шарты мына түрге келеді

$$\rho(E)g(E)\Delta E = 1 \quad (11)$$

Бұл теңдікті ΔE шаманың анықтамасы ретінде қарастыруға болады.

(11) теңдіктен энергияның орташа мәні кезіндегі таралу функциясы ықтималдықтан артық ΔW жүйе микрокүй саны шығды.

$$\Delta W = g(E)\Delta E = \rho^{-1}(E) = \rho^{-1}H(q, p)$$

Шаманы анықтасақ

$$S = k \ln \Delta W = -k \ln \rho(E) = -k \ln \rho H(q, p) \quad (12)$$

(k - **Больцман тұрақтысы**, $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж} \cdot \text{К}^{-1}$) және бұл теңдікті **жүйе энтропиясы** деп атаймыз. (12) қатынас- (**Больцман бойынша**) статистикалық **энтропия** анықтамасы. Кейінірек термодинамикалық барлық қатынастар осы теңдік шығатын көреміз, яғни статистикалық физиканы аламыз. Сондықтан “статистикалық” S энтропияны **термодинамикалық энтропиямен** теңестіреміз.

(12) теңдіктен энтропия микрокүй санын анықтайды

$$\Delta W = \exp\left(\frac{S}{k}\right)$$

(12) анықтамалықтан шығатын қорытынды S - **экстенсивті шама**. Шынында да, бірнеше тәуелсіз статистикалық ішкі жүйеден тұратын (6) жүйе қарастыра отырып, барлық жүйенің энтропиясын аламыз

$$S = -k \ln \rho(E) = -k \ln \prod_l \rho_l(E_l) = -k \sum_l \ln \rho_l(E_l) = \sum_l S_l.$$

Бақылау сұрақтары:

- 1) Фазалық кеңістікте $dqdp$ көлемдегі микрокүйлер саны қалай анықталады?
- 2) Статистикалық энтропия қалай анықталады?

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