1.6. Фазовое пространство. Функция распределения.

1.6.1. Фазовое пространство и вероятность.

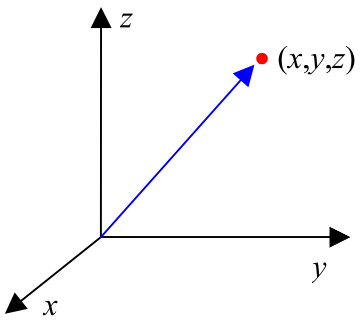
Рассмотрим идеальный газ (нет взаимодействия между молекулами). Полная энергия идеального газа есть сумма кинетических энергий отдельных молекул:

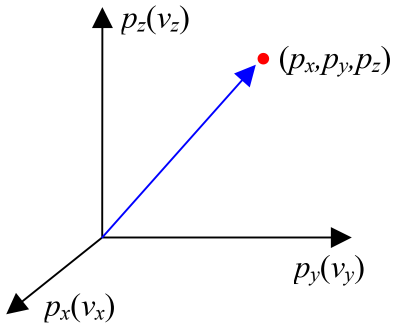
$$E = E_1 + E_2 + \ldots + E_i + \ldots, \qquad (1.6.1)$$

где $E_i = \dfrac{mV_i^2}{2} = \dfrac{p_i^2}{2m}$. Поскольку молекулы не взаимодействуют, то каждая молекула может быть рассмотрена как квазизамкнутая подсистема. Обмен энергиями происходит при редких столкновениях молекул. Все молекулы обладают разными скоростями, даже в положении равновесия (опыт Штерна подтвердил, что скорости молекул различные).

Подсистему (1 молекула) будем характеризовать координатами и скоростями (или импульсами): x, y, z, p_x, p_y, p_z. Таким образом, 6 величин задают положение частицы и ее состояние.

Вводят понятие *фазового пространства* как пространства координат и импульсов (скоростей):





Для подсистемы из одной молекулы вводят 6-ти мерное пространство (это чисто математическое понятие). Различные состояния частицы можно изображать точками этого фазового пространства. С течением времени состояние частицы будет меняться, и тогда, соединяя все положения точек в различные моменты времени, получим *фазовую линию* в этом пространстве. Если система состоит из 2-х молекул, то их состояние задается 6+6 = 12 величинами, т.е. имеем 12-ти мерное фазовое пространство для такой подсистемы.

Рассмотрим фазовое пространство в общем случае. Пусть рассматриваемая макросистема имеет n степеней свободы, т.е. положение точек этой системы в пространстве характеризуется n координатами, которые обозначим за q_i (i=1,2,3,...,n). Состояние системы тогда определяется n координатами q_i и n скоростями $\dot{q}_i = v_i$ (или импульсами p_i). Введем фазовое пространство системы с числом измерений $2n$. С течением времени состояние системы меняется и в фазовом пространстве, и это описывается фазовой линией.

Каждая система имеет свое фазовое пространство. Вероятность реализации различных состояний системы есть функция от координат и импульсов той системы. Координаты и импульсы в этом пространстве меняются непрерывном образом, а для непрерывных значений необходимо задавать элемент объема фазового пространства (как произведение координатной и импульсной частей объема):

$$d\Gamma = d\Gamma_q \cdot d\Gamma_p \qquad (1.6.2)$$

Это малая область пространства, куда может попасть система (поскольку точка не имеет измерения). Для одной частицы имеем следующий элемент объема, записанный более подробно:

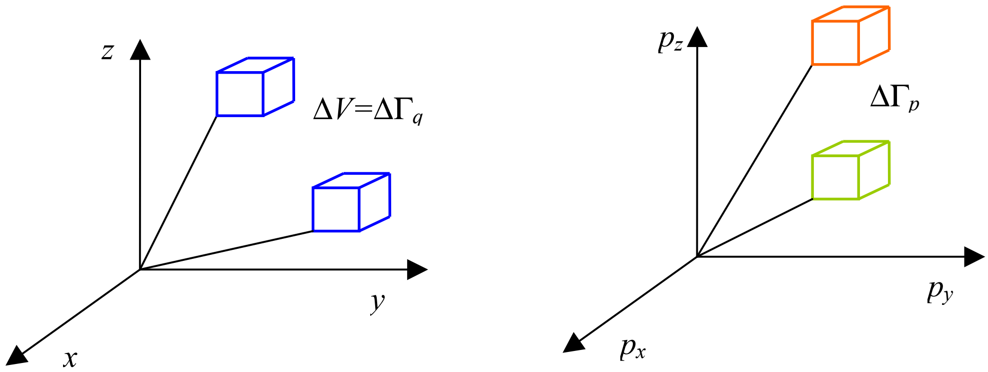
$$d\Gamma = dx\, dy\, dz\, dp_x\, dp_y\, dp_z\,. \qquad (1.6.3)$$

Для n частиц имеем:

$$d\Gamma = d\Gamma_q \cdot d\Gamma_p = dx_1 dy_1 dz_1 dx_2 dy_2 dz_2 \ldots dp_{1x} dp_{1y} dp_{1z} dp_{2x} dp_{2y} dp_{2z} \ldots dp_{nx} dp_{ny} dp_{nz} \qquad (1.6.4)$$

Рассмотрим вероятность попадания системы в элемент этого фазового объема.

Сначала для идеального газа. Вероятность нахождения частицы в объеме ΔV известна: $\mathsf{P} \sim \dfrac{\Delta V}{V}$, где ΔV - координатный кусок фазового пространства, V - весь пространственный объем. В силу равновероятности нахождения частицы в любой точке пространства можно записать $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$. Причем в идеальном газе



можно следить за состоянием 1 частицы в течение длительного времени (и определить Δt_i в каждом i-ом состоянии) или следить сразу за всем коллективом и считать, сколько частиц попало в данный элемент фазового объема. Итак, для координатной части вероятность: $d\mathbf{P} \sim dxdydz$ (если нет внешнего поля).

Для пространства импульсов необходимо помнить, что энергия системы постоянна:

$$E = const = \sum_i \frac{p_i^{\ 2}}{2m} \tag{1.6.5}$$

и поэтому это вносит ограничение на элементы объема импульсов.

Итак, в общем случае запишем элемент фазового объема $d\Gamma = d\Gamma_q \cdot d\Gamma_p$, и тогда вероятность частицы попасть в этот элемент фазового объема можно записать:

$$d\mathrm{P} = \rho(q_1, q_2, ..., q_n, p_1, ..., p_n)\, d\Gamma, \tag{1.6.6}$$

где $\rho(q_1, ..., q_n, p_1, ..., p_n) = \rho(q, p) = \rho$ - *плотность вероятности* для системы иметь координаты и импульсы (скорости) в этом элементе объема. Такая запись для вероятности справедлива вообще для любой квазизамкнутой системы.

Таким образом, наша задача состоит в нахождении этой функции распределения $\rho(q, p)$ - плотности вероятности.

1.6.2. Свойства функции распределения.

Рассмотрим основные свойства функции распределения.

1) Выполняется условие нормировки:

$$\int_\Gamma \rho(p, q)d\Gamma = 1, \tag{1.6.7}$$

где интегрирование ведется по всему фазовому объему.

2) Средние значения определяются следующим образом: если теперь имеем некоторую физическую величину $L(p,q) = L(x_1, y_1, z_1, ..., p_{1x}, p_{1y}, p_{1z}, ...)$, то для среднего значения этой величины получаем:

$$\langle L \rangle = \int_\Gamma L(p,q)\rho(p,q)d\Gamma \tag{1.6.8}$$

3) Свойство стационарности. Рассматриваем подсистему в течение большого промежутка времени, который разобьем на большое число маленьких промежутков с моментами времени между ними t_1, t_2, t_3,.... В эти моменты времени подсистема в фазовом пространстве изображается точкой. Совокупность этих точек распределяется в фазовом пространстве так, что их количество в каждой единице объема этого пространства (т.е. их плотность) будет пропорционально значению функции распределения $\rho(q, p)$.

Можно ввести в рассмотрение совокупность одинаковых систем (столько систем, сколько моментов времени t_1, t_2, t_3,...), каждая из которых находится в данный момент времени в одном из состояний, в которых находится наша подсистема в один из моментов времени t_1, t_2, t_3,... Т.е. вместо того, чтобы рассматривать состояние одной и той же подсистемы в разные моменты времени, можно рассматривать совокупность одинаковых систем, находящихся одновременно в разных состояниях, фазовые точки которых распределены в фазовом пространстве сообразно с функцией распределения.

Через момент времени Δt состояния всех одновременно рассматриваемых подсистем изменяется согласно уравнениям механики. Новые состояния подсистем (они совпадают с состояниями исходной подсистемы в моменты $t_1+\Delta t$, $t_2+\Delta t$,....) изобразятся в фазовом пространстве точками, которые с тем же правом, что и предыдущие, будут распределены с плотностью ~ $\rho(q,p)$. Т.е. обе совокупности точек изображаются одной и той же функцией распределения. Это свойство квазизамкнутых систем - *свойство стационарности статистического распределения*.

Теорема Лиувилля (J.Liouville, 1838, французский физик): **всякий объем фазового пространства при своем движении соответственно изменению состояния системы остается по величине неизменным**.

Таким образом, $\int\limits_{\Gamma} d\Gamma = const$ - и здесь интегрирование относится к той движущейся области фазового пространства, которую занимают точки первоначально выбранной области. Другими словами, если в начальный момент времени фазовые точки q_i, p_i непрерывно заполняли некоторую область Γ в фазовом пространстве, а с течением времени перешли в другую область Γ_t этого пространства, то, согласно теореме Лиувилля, соответствующие фазовые объемы ($2n$ -мерные интегралы, где n число степеней свободы системы) равны между собой:

$$\int\limits_{\Gamma} dq\,dp = \int\limits_{\Gamma_t} dq\,dp = \int\limits_{\Gamma} d\Gamma = const \qquad (1.6.9)$$

Таким образом, движение точек, изображающих состояния системы в фазовом пространстве, подобно движению несжимаемой жидкости. Это означает, что плотности точек в этих объемах одинаковы, а они пропорциональны $\rho(q,p)$. Тогда приходим к заключению: $\rho(q,p)$ - *функция распределения постоянна вдоль фазовых линий, соответствующих движению* (изменению состояния) рассматриваемой системы:

$$\frac{\partial \rho(q,p)}{\partial t} = 0 \qquad (1.6.10)$$

Чтобы функция распределения $\rho(q,p)$ была постоянной во времени в разрешенной области фазового пространства, она должна зависеть от такой комбинации переменных p_x, p_y, p_z, которая не зависит от t, т.е. от интегралов движения. Говорят, $\rho(q,p)$ - функция распределения, являясь функцией механических инвариантов, сама есть интеграл движения. Такие инварианты (или интегралы движения) хорошо известны: *энергия*, *импульс* (3 компоненты), *момент импульса* (3 компоненты). Импульс и момент импульса связаны с движением тела или газа как целого, а именно с поступательным и вращательным движением. Поэтому, рассматривая в системе отсчета, где сосуд с газом покоится, то импульс и момент импульса можно исключить из рассмотрения.

Таким образом, для идеального газа и вообще любой квазизамкнутой системы функция распределения $\rho(q,p)$, описывающая статистическое состояние системы, зависит только от энергии.

Для одной молекулы можно записать:

$$\rho(x,y,z,p_x,p_y,p_z) = \rho(E(x,y,z,p_x,p_y,p_z)). \qquad (1.6.11)$$

Для идеального газа энергия 1 молекулы: $E(p_x,p_y,p_z) = \dfrac{p_x^{\,2}+p_y^{\,2}+p_z^{\,2}}{2m} = \dfrac{p^2}{2m}$. В общем случае E - это полная энергия квазисистемы, включающая поступательную, вращательную и колебательные энергии, а также потенциальную энергию.

Вывод: энергия в статистике приобретает исключительную роль.