

1.6. Фазовое пространство. Функция распределения.

1.6.1. Фазовое пространство и вероятность.

Рассмотрим идеальный газ. Это газ, в котором отсутствует взаимодействие между молекулами. Полная энергия идеального газа есть сумма кинетических энергий отдельных молекул:

$$E = E_1 + E_2 + \dots + E_i + \dots, \quad (1.6.1)$$

где $E_i = mV_i^2/2 = p_i^2/2m$. Поскольку молекулы не взаимодействуют, то каждая молекула может быть рассмотрена как квазизамкнутая подсистема. Энергия молекулы может рассматриваться как случайная величина. Обмен энергиями происходит при редких столкновениях молекул. Все молекулы обладают разными энергиями и разными скоростями, даже в положении равновесия. Опыт Штерна и другие последующие эксперименты подтвердили, что скорости молекул различные. Поэтому скорость молекул тоже может рассматриваться как случайная величина.

Подсистему, т.е. 1 молекулу, будем характеризовать координатами и импульсами (или скоростями): 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).

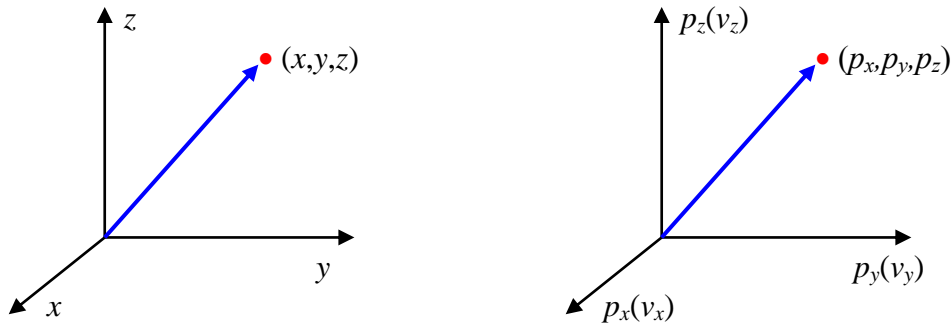


Рис. 6.1.

Для подсистемы, состоящей из одной молекулы, имеем 6-ти мерное пространство (рис. 6.1). 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 или траекторию* 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, то есть положение точек этой системы в пространстве характеризуется n координатами, которые обозначим за q_i ($i=1,2,3,\dots,n$). Тогда полное состояние системы 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 эти изменения со временем описываются 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 непрерывным образом, а для непрерывных значений необходимо задавать элемент объема фазового пространства как произведение координатной и импульсной частей объема:

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

Это малая область фазового пространства, куда может «попасть» система (поскольку точка не имеет измерения). Для одной частицы элемент объема можно записать более подробно в следующем виде:

$$d\Gamma = d\Gamma_q \cdot d\Gamma_p = dx dy dz \cdot dp_x dp_y dp_z. \quad (1.6.3)$$

Для N частиц одноатомного газа имеем:

$$d\Gamma = d\Gamma_q \cdot d\Gamma_p = dx_1 dy_1 dz_1 dx_2 dy_2 dz_2 \dots dp_{1x} dp_{1y} dp_{1z} dp_{2x} dp_{2y} dp_{2z} \dots dp_{Nx} dp_{Ny} dp_{Nz} \quad (1.6.4)$$

Рассмотрим вероятность попадания системы в элемент этого фазового объема.

Сначала рассмотрим идеальный газ.

Напомним, что в силу равновероятности нахождения частицы в любой точке пространства (что справедливо, если нет внешнего поля) вероятность нахождения частицы в некотором геометрическом объеме ΔV известна:

$$P \sim \frac{\Delta V}{V},$$

где $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$ – **координатный** «кусоч» фазового пространства (рис. 6.2), а V – весь пространственный объем. Напомним также, что можно следить за состоянием 1 частицы в течение длительного времени и определять время жизни Δt_i в каждом i -ом состоянии или элементе объема. Или иначе, можно следить сразу за всем коллективом частиц и рассматривать, сколько частиц попало в данный элемент фазового объема.

Итак, для координатной части вероятность попадания одной частицы в элемент объема пропорциональна объему: $dP \sim dx dy dz$. Если вероятность попадания в различные объемы пространства неодинакова, то тогда для вероятности можно записать

$$dP = \rho(x, y, z) dx dy dz = \rho(x, y, z) d\Gamma_q,$$

где $\rho(x, y, z)$ – плотность вероятности попадания в объем $dx dy dz$.

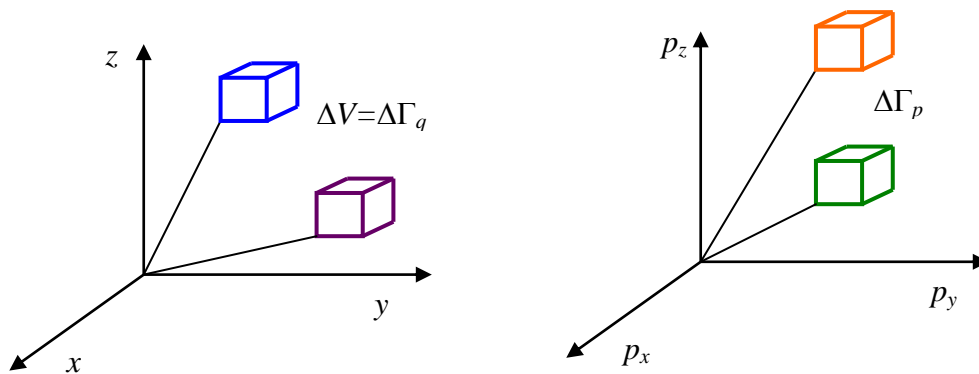


Рис. 6.2.

Для пространства импульсов также можно ввести элемент объема $\Delta \Gamma_p$, где $d\Gamma_p = dp_x dp_y dp_z$ (см рис. 6.2), и вероятность попадания частицы в этот малый элемент объема будет также пропорциональна его величине:

$$dP = \rho(p_x, p_y, p_z) d\Gamma_p,$$

где $\rho(p_x, p_y, p_z)$ – плотность вероятности найти частицу газа с импульсом p и его проекциями (p_x, p_y, p_z) . Однако при определении вероятности для частицы (системы) попасть в этот элемент объема необходимо помнить, что энергия системы ограничена и постоянна:

$$E = const = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} \quad (1.6.5)$$

Это вносит ограничение на элементы объема импульсов, в которых может находиться система.

Теперь рассмотрим общий случай системы с n степенями свободы.

Запишем в пространстве $2n$ измерений элемент фазового объема $d\Gamma = d\Gamma_q \cdot d\Gamma_p$, и тогда вероятность частицы попасть в этот элемент фазового объема можно записать:

$$dP = \rho(q_1, q_2, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n) d\Gamma, \quad (1.6.6)$$

где $\rho(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n) = \rho(q, p) = \rho$ – **функция распределения** или **плотность вероятности** для системы иметь координаты и импульсы (скорости) в малой окрестности данного элемента объема $d\Gamma$. Такая запись для вероятности попасть в элемент фазового пространства $d\Gamma$ справедлива вообще для **любой квазизамкнутой системы**.

Таким образом, наша задача состоит в нахождении этой функции распределения $\rho(q, p)$ – плотности вероятности. Ее знание позволит определить средние значения всех физических величин системы большого числа частиц.

1.6.2. Свойства функции распределения.

Рассмотрим основные свойства функции распределения.

1) Выполняется условие нормировки:

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

где интегрирование ведется по всему фазовому объему.

2) Средние значения определяются следующим образом. Если теперь имеем некоторую физическую величину $L(p, q) = L(x_1, y_1, z_1, \dots, p_{1x}, p_{1y}, p_{1z}, \dots)$, являющуюся функцией координат и импульсов, то среднее значение этой величины определяется обычной формулой теории вероятностей:

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

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, \dots . 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 поступить иначе: ввести в рассмотрение совокупность одинаковых подсистем, причем взять столько подсистем, сколько выбранных моментов времени t_1, t_2, t_3, \dots . Пусть каждая из подсистем находится в данный момент времени в одном из тех состояний, в которых находилась наша одна подсистема в один из выбранных моментов времени (t_1, t_2, t_3, \dots). Иначе говоря, вместо того, чтобы рассматривать состояние одной и той же подсистемы в разные моменты времени, можно рассматривать совокупность одинаковых подсистем, находящихся одновременно в разных состояниях, фазовые точки которых распределены в фазовом пространстве в соответствии с функцией распределения $\rho(q, p)$.

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

Примечание 1. Эргодическая гипотеза в статистической физике — предположение о том, что средние по времени значения физических величин, характеризующих систему, равны их средним статистическим значениям; служит обоснованием статистической физики. В физике, в частности и в термодинамике, эргодическая гипотеза говорит, что за длительные периоды времени время, проведенное частицей в некоторой области фазового пространства микросостояний с той же самой энергией, пропорционально объему этой области, то есть, что все доступные микросостояния равновероятны за длительный период времени.

Физические системы, для которых справедлива Эргодическая гипотеза, называются эргодическими. Точнее, в классической статистической механике равновесных систем Эргодическая гипотеза есть предположение о том, что средние по времени от функций, зависящих от координат и импульсов всех частиц системы (фазовых переменных), взятые по траектории движения системы как точки в фазовом пространстве, равны средним статистическим по равномерному распределению фазовых точек в тонком (в пределе бесконечно тонком) слое энергии вблизи поверхности постоянной энергии.

В статистической физике доказывается теорема Лиувилля (J. Liouville, 1838, французский физик) о неизменности объема фазового пространства.

Теорема Лиувилля: всякий объем фазового пространства при своем движении соответственно изменению состояния системы остается по величине неизменным.

Таким образом, объем фазового пространства $\int_{\Gamma} d\Gamma = const$, если 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:

$$\int_{\Gamma} dq dp = \int_{\Gamma_t} dq dp = \int_{\Gamma} d\Gamma = const \quad (1.6.9)$$

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.

Таким образом, свойство стационарности функции распределения можно записать в виде:

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

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 в механике для замкнутых систем. Это – *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 газ 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 ее энергии*.

$$\rho(q, p) = \rho(E(q, p)) \quad (1.6.11)$$

В общем случае E – это полная энергия квазизамкнутой системы, включающая поступательную, вращательную и колебательные энергии, а также потенциальную энергию.

Для подсистемы, состоящей из одной молекулы, можно записать:

$$\rho(x, y, z, p_x, p_y, p_z) = \rho(E(x, y, z, p_x, p_y, p_z)). \quad (1.6.12)$$

Для идеального газа полная энергия одной одноатомной молекулы равна только ее кинетической энергии поступательного движения:

$$E(p_x, p_y, p_z) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}.$$

Основной вывод всего этого рассмотрения: *энергия в статистике приобретает исключительную роль.*